

**BOOTSTRAP E MÍNIMOS QUADRADOS
GENERALIZADOS COM MATRIZ DE
COVARIÂNCIA ESTIMADA. ANÁLISE
COMPARATIVA DO DESEMPENHO EM UM
MODELO COM REPLICAÇÕES**

ANSELMO CHAVES NETO

Tese de
Professor Titular na
Área de Probabilidade e Estatística do
Departamento de Informática da
Universidade Federal do Paraná

1987

BOOTSTRAP E MÍNIMOS QUADRADOS GENERALIZA
DOS COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA ESTIMADA.
ANÁLISE COMPARATIVA DO DESEMPENHO EM UM
MODELO COM REPLICAÇÕES CORRELACIONADAS.

ANSELMO CHAVES NETO

Para:

Dra. Laura, Sonía, Isabel-
la, Paula e Helena; que
continuam sendo as mulhe -
res da minha vida.

A G R A D E C I M E N T O S

Desejo agradecer a todos que de alguma forma colaboraram comigo neste trabalho, desde a computação eletrônica até a datilografia.

Particularmente, meus sinceros agradecimentos à UFPR que possibilitou, com o seu CCE-UFPR, a execução das simulações necessárias.

Í N D I C E

C A P Í T U L O "I"

"BOOTSTRAP" E MÍNIMOS QUADRADOS GENERALIZADOS COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA ESTIMADA: OS MÉTODOS

I.1.	"BOOTSTRAP": UMA TÉCNICA COMPUTACIONALMENTE INTENSIVA.....	006
I.1.1.	A técnica "bootstrap".....	006
I.1.2.	A relação entre o "bootstrap" e o "Jackknife".	008
I.1.3.	As aplicações do "bootstrap".....	010
I.1.3.1.	Aplicações na Análise Estatística em geral....	011
I.1.3.2.	Aplicações na Análise de Regressão.....	012
I.2.	MÍNIMOS QUADRADOS GENERALIZADOS COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA ESTIMADA.....	018
I.2.1.	Enfoque geral do problema e do método.....	018

C A P Í T U L O "II"

EXPERIMENTO COM N REPLICAÇÕES EM CADA PONTO EXPERIMENTAL. AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA.

II.1.	DESCRIÇÃO DA SITUAÇÃO BÁSICA DO EXPERIMENTO.....	021
II.2.	O MODELO DO AJUSTE DA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA.....	022

II.3	ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO DA SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS.....	024
II.3.1.	O estimador.....	024
II.3.2.	A variância do estimador de β	029
II.4.	RESÍDUOS ORIUNDOS DE UM ÚNICO AJUSTE MQO PARA AS N REPLICAÇÕES.....	032
II.4.1.	O fator de correção dos resíduos.....	032
II.4.2.	O estimador não viciado para a variância σ^2	035
II.5.	RESÍDUOS ORIUNDOS DE N AJUSTES, POR MQO , FEITOS COM OS k PONTOS EXPERIMENTAIS NAS N REPLICAÇÕES.....	043
II.5.1.	Estimadores de σ^2 e ρ baseados nos resíduos de ajustes separados.....	043
II.5.2.	Um estimador para ρ baseado nos coeficientes de regressão, obtidos em ajustes dos Q pares distintos de resíduos (\hat{e}_i, \hat{e}_j) oriundos dos ajustes separados.....	052
II.6.	OS ESTIMADORES DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA DE $\hat{\beta}_{mqg}$	053

CAPÍTULO "III"

SIMULAÇÃO E CONCLUSÃO

III.1	AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA: O DE- LINEAMENTO DE BOX (CUBO+ESTRELA).....	055
III.2	RESÍDUOS: DISTRIBUIÇÃO DE PROBABILIDADE E GERAÇÃO.....	059

III.3.	OS CASOS ABORDADOS NA SIMULAÇÃO COMPARATI- VA ENTRE MQG-1 E "BOOTSTRAP".....	061
III.3.1.	Delineamento composto central: "cubo + es- trela + 6 pontos centrais".....	061
III.3.2.	Delineamento composto central: "cubo + es- trela + 4 pontos centrais".....	070
III.4.	CONCLUSÃO FINAL.....	079
A P Ê N D I C E.....		080
R E F E R Ê N C I A S.....		092

INTRODUÇÃO

Na década de 40 surgiu uma máquina, em parte devido ao esforço de guerra anglo-americano, que veio mudar muita coisa na vida humana. Os hábitos e, principalmente, a ciência humana sofreram de alguma forma, modificações. Esta máquina, denominada, hoje, Computador Eletrônico, teve o seu primeiro modelo, à válvulas, construído em 1941. Era o "Mark I", projetado e construído na Universidade de Harvard pelo Prof. Howard Aiken. Da primeira geração de computadores, à válvula até os modernos computadores de hoje com a fabricação de circuito integrado em série, muito progresso científico foi feito e em particular a Estatística também teve um significativo desenvolvimento.

É interessante observar que o processamento mecânico de dados teve origem com um estatístico. O americano Hermann Hollerith iniciou, em 1890, o processamento de dados de uma forma eletro-mecânica com o censo americano daquele ano. O tempo gasto para se fazer a apuração de mais de 55 milhões de questionários foi abreviado de 7 anos para 4 semanas, com a utilização das máquinas eletro-mecânicas de cartão perfurado do Dr. Hollerith. Herman Hollerith e Charles Babbage (criador da primeira calculadora automática do mundo em 1833) são considerados os verdadeiros pais espirituais dos computadores de hoje.

De uma geração de computador para outra, bem como de um modelo para outro dentro de uma geração, o processamento de dados foi ficando mais barato e ainda muito mais rápido. Deste modo, algumas técnicas científicas que eram inviáveis devido a

grande quantidade de cálculos morosos, passaram a ser muito utilizadas. Especificamente, na Estatística, é possível citar o caso da Análise Fatorial. Esta técnica surgiu no início do século XX com Charles Spearman e Karl Pearson. Teve um bom desenvolvimento teórico, entretanto não foi aplicada de maneira plena devido a dificuldade de computação. A partir da década de 50 esta técnica multivariada tomou um novo impulso, principalmente nas aplicações, com o advento do processamento eletrônico de dados.

A computação veloz e barata não só facilitou o emprego de procedimentos científicos, como também permitiu o desenvolvimento de novas técnicas antes inimagináveis. Como se sabe, muitos métodos estatísticos de uso corrente, hoje em dia, foram desenvolvidos entre 1800 e 1930, uma época em que a computação de dados era lenta e cara. Hoje a computação é rápida e barata; a diferença pode ser medida em múltiplos de milhão. Assim, as técnicas antigas foram desenvolvidas considerando-se que as operações matemáticas associadas com a análise estatística tinham de ser feitas a mão ou com a ajuda de uma calculadora de mesa. É claro que estes cálculos, quase sempre, podem ser abreviados enormemente se as expressões matemáticas nas quais se baseiam tiverem uma forma analítica simples. Deste modo, a teoria estatística sofreu alguma influência das circunstâncias da época e tendeu a abordar apenas as propriedades da amostra estatística que podem ser facilmente tratadas analiticamente; o que é o caso da média, desvio-padrão e coeficiente de correlação, por exemplo. Um outro fator que tem limitado a teoria estatística desde o seu início é a suposição de normalidade para a população de origem da amostra. Se a distribuição Gaussiana é empregada, supõe-se que a variável aleatória observada experimentalmente possui os seus

valores dispersos simetricamente em torno do verdadeiro valor . Simulações experimentais têm mostrado que a teoria Gaussiana ainda funciona muito bem quando a distribuição é apenas aproximadamente normal. Assim, é possível fazer inferências confiáveis sem computador. Mas, quando os dados não satisfazem a suposição de normalidade e esta é usada, os métodos estatísticos produzem resultados muito pouco confiáveis.

Novas técnicas estatísticas, de computação-intensiva , surgiram em função do custo baixo e velocidade alta da computação eletrônica de dados atual. E, podem resolver muitos problemas sem a suposição de distribuição Gaussiana para os dados. Uma destas técnicas modernas é o "bootstrap", um método de computação intensiva inventado em 1977 por Bradley Efron [1] extremamente simples, mas que não poderia ter sido pensado na época da calculadora de mesa devido a imensa quantidade de cálculos necessários na sua aplicação. O "bootstrap" está relacionado com o "jackknife" de Quenouille-Tukey [9], e trata-se de um procedimento não-paramétrico de reamostragem, computacionalmente intensivo, usado para estimação de distribuições amostrais. Desde o seu surgimento o "bootstrap" tem merecido profundo estudo por parte dos estatísticos, não só na parte teórica com Bickel e Freedman em 1981 [2], Singh em 1981 [3] e Beran em 1982 [4], como também na parte de aplicações com Efron em 1979 [5], Freedman em 1981 [6], Rubin em 1981 [7] e Freedman & Peters em 1984 [8].

O objetivo deste trabalho é o estudo da aplicação do "bootstrap" em um caso de Análise de Regressão, onde a solução usual é por resultado assintótico, ou melhor procurou-se responder a pergunta: "será o "bootstrap" equivalente ao Método dos Mínimos Quadrados Generalizados (MQG-1) no ajuste do modelo

$$\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$$

quando $V(\underline{\varepsilon}) = E(\underline{\varepsilon}\underline{\varepsilon}') = \Sigma$ é desconhecida, mas da forma

$$kn \Sigma kn = \begin{bmatrix} E & & & & 0 \\ & E & & & \\ & & E & \ddots & \\ 0 & & & \ddots & E \end{bmatrix}$$

com

$$n E_n = \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho & \dots & \rho \\ \rho & 1 & \rho & \dots & \rho \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho & \rho & \rho & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad ?"$$

A idéia deste estudo surgiu em agosto de 1984. Naquela época, na UNICAMP, eram realizados seminários sobre a técnica "bootstrap", durante os quais eram apresentados por um pequeno grupo de professores e alunos do Mestrado em Estatística, os artigos publicados nas revistas especializadas. Assim, a partir da apresentação do artigo "Bootstrapping a Regression Equation: Some Empirical Results" de autoria de David A. Freedman and Stephen C. Peters [8], foi lançada a semente deste trabalho. De início foi feita a abordagem com a matriz E dada por:

$$E = \begin{bmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{bmatrix},$$

ou seja, um correlacionamento entre apenas duas replicações [10]. Agora estudou-se o problema para um número de replicações correlacionadas n qualquer. Resultados generalizados foram obtidos dentro desta nova problemática.

A apresentação do estudo é feita em três capítulos nos

quais desenvolveu-se a metodologia teórica a ser aplicada e a simulação. No apêndice se descreve os principais programas computacionais necessários na simulação. De início, apresenta-se o "bootstrap" de uma maneira geral e em seguida este método no contexto da Análise de Regressão. O Método dos Mínimos Quadros Generalizados com matriz de covariância estimada (MQG-1) é abordado, bem como as suas limitações e possibilidade de emprego do "bootstrap". O problema da correlação entre replicações em um experimento fatorial é enfocado, embora do ponto de vista de um ajuste de uma superfície de resposta, que é a situação no contexto estudado. Um fator de correção para os resíduos em um ajuste por MQG-1 é determinado, bem como estimadores da variância e coeficiente de correlação entre as replicações considerando ajustes separados por Mínimos Quadrados Ordinários (MQO). A simulação Monte-Carlo que se faz é descrita no capítulo III e foi usada no sentido de comparar a técnica "bootstrap" com a metodologia usual MQG-1. Por último, no apêndice, descreve-se os programas em FORTRAN e as sub-rotinas IMSL necessárias na simulação.

Quanto a forma de apresentação da metodologia teórica desenvolvida, no texto, é necessário esclarecer que os resultados oriundos da análise estão enunciados como tais e demonstrados. Já outros resultados provenientes de outras fontes estão referenciados e alguns desenvolvidos e detalhados para melhor condução do raciocínio no texto, embora sem a conotação típica de prova.

I. "BOOTSTRAP" E MÍNIMOS QUADRADOS GENERALIZADOS COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA ESTIMADA: OS MÉTODOS.

I.1 "BOOTSTRAP": UMA TÉCNICA COMPUTACIONALMENTE INTENSIVA

I.1.1 A TÉCNICA "BOOTSTRAP"

O "bootstrap" é um procedimento não-paramétrico de reamostragem, computacionalmente intensivo, usado para estimação de distribuições amostrais. Daí, depreende-se que ele ainda terá muitas aplicações, mormente pela sua versatilidade e quantidade relativamente grande de artigos que têm surgido sobre a técnica nas revistas especializadas. Para descrever este método, uma exposição clara e sucinta é a feita por Beran [4]. Assim, considere-se as etapas seguintes:

i) seja a amostra aleatória $\underline{x}' = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ com as variáveis aleatórias x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ independentes e identicamente distribuídas com função distribuição F .

ii) Considere $\{\hat{T}_n = \hat{T}_n(\underline{x}); n > 1\}$ estatísticas reais e ainda $\{T_n(F); n > 1\}$ funcionais reais tais que

$$\sqrt{n}[\hat{T}_n - T_n(F)] \xrightarrow{D} N(0, \sigma^2_{\hat{T}}). \quad (1.1)$$

iii) Considere $H_n(x, F)$ a função distribuição exata de $\sqrt{n}[\hat{T}_n - T_n(F)]$.

Então, o problema que surge nesta etapa é a estimação de $H_n(x, F)$ ou funcionais de $H_n(x, F)$, usando-se a amostra. Contudo, a média e variância de $H_n(x, F)$ são, respectivamente, o vício e a variância de \hat{T}_n quando \hat{T}_n é considerado um estimador de $T_n(F)$. E, o estimador "bootstrap" de $H_n(x, F)$ é $H_n(x, \hat{F}_n)$, onde \hat{F}_n é a função distribuição amostral. É claro que o cálculo exato de $H_n(x, \hat{F}_n)$ é difícil, logo costuma-se fazer uma aproximação Monte-Carlo para $H_n(x, \hat{F}_n)$. A consistência do estimador "bootstrap" já foi provada por Efron [1] e por Bickel e Freedman [2].

- iv) Como F é desconhecida, seja \hat{F}_n o estimador não paramétrico de F construído colocando-se massa igual a n^{-1} em cada ponto amostral x_1, x_2, \dots, x_n . Da amostra original \underline{x} retiram-se amostras aleatórias simples com reposição, de mesmo tamanho n , $\underline{x}_1^*, \underline{x}_2^*, \dots, \underline{x}_{n^*}^*$. A reamostra \underline{x}_i^* , $i = 1, 2, 3, \dots, n^*$, é formada portanto das observações $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ e é denominada na literatura como amostra "bootstrap". O número de reamostras ou amostras "bootstrap" n^* é conhecido como "número de repetições "bootstrap"". Para cada amostra "bootstrap" \underline{x}^* calcula-se $\hat{T}_n^* = \hat{T}_n^*(\underline{x}^*)$. Deste modo, \hat{T}_n^* é o estimador "bootstrap" de $T_n(F)$ e o conjunto de valores $\{\hat{T}_n^*(\underline{x}_i^*); i = 1, 2, 3, \dots, n^*\}$ corresponde a distribuição "bootstrap" de \hat{T}_n e que faz uma aproximação da distribuição amostral da estatística $\hat{T}_n(\underline{x}, F)$.

I.1.2 A RELAÇÃO ENTRE O "BOOTSTRAP" E O "JACKKNIFE"

Considerando-se o contexto da etapa (iv) do ítem I.1.1, seja n_i^* o número de vezes em que se observou $x_i^* = x_i$, na reamostragem "bootstrap". Desta forma, o vetor $\underline{N}^* = [n_1^*, n_2^*, n_3^*, \dots, n_n^*]'$, tem uma distribuição multinomial com média dada por

$$\begin{aligned} E_*(\underline{N}^*) &= [E_*(n_1^*), E_*(n_2^*), E_*(n_3^*), \dots, E_*(n_n^*)]' = \\ &= [1, 1, 1, \dots, 1]' = \underline{1} \end{aligned} \quad (1.2)$$

pois $E_*(n_i^*) = n \cdot \frac{1}{n} = 1$, já que $\sum_{i=1}^n n_i^* = n$. Logo o vetor das proporções $\underline{P}^* = [P_1^*, P_2^*, P_3^*, \dots, P_n^*]'$, com $P_i^* = n_i^*/n$, possui vetor de médias igual a

$$E_*(\underline{P}^*) = \frac{1}{n} \cdot E_*(\underline{N}^*) = \frac{1}{n} \cdot \underline{1}_n \quad (1.3)$$

e matriz de covariância

$$V_*(\underline{P}^*) = E_*(\underline{P}^* - \underline{1}/n)(\underline{P}^* - \underline{1}/n)' = \frac{1}{n^2} (I_n - \frac{1}{n} \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n') \quad (1.4)$$

com I_n a matriz identidade de ordem n e $\underline{1}_n$ o vetor de uns de dimensão n .

O estimador $\hat{T}_n^* = \hat{T}_n^*(\underline{x}^*, \hat{F})$ pode ser colocado em função de \underline{P}^* ,

$$\hat{T}_n^* = \hat{T}_n^*(\underline{x}^*, \hat{F}) = \hat{T}_n^*(\underline{P}^*) \quad (1.5)$$

e uma aproximação da distribuição "bootstrap" de $\hat{T}_n^*(\underline{x}^*, \hat{F})$ pode ser alcançada expandindo-se $\hat{T}_n^*(\underline{P}^*)$ por série de Taylor em torno do valor $\underline{P}^* = \underline{1}/n$. Assim, tem-se:

$$\begin{aligned} \hat{T}_n^*(P^*) &\doteq \hat{T}_n^*(\underline{1}/n) + (P^* - \underline{1}'/n) \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \\ \vdots \end{bmatrix} + \\ &+ \frac{1}{2}(P^* - \underline{1}'/n) \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial^2 \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^* \partial P_j^*} \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot (P^* - \underline{1}/n)' , \end{aligned} \quad (1.6)$$

assumindo-se na expansão (1.6) que $\hat{T}_n^*(P^*)$ pode receber interpolação entre as observações que originalmente formaram P^* e ainda ignorando a restrição $\sum_{i=1}^n P_i = 1$. A justificativa destas conveniências pode ser feita pelo conhecimento de que todos os vetores P^* tem componentes não-negativas e pelo menos 1 positiva, então

$$\hat{T}_n^*(P^*) = \hat{T}_n^*\left(\frac{P^*}{\sum_{i=1}^n P_i^*}\right). \quad (1.7)$$

Deste modo, por (1.7), tem-se que

$$\begin{aligned} \underline{1}_n \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \\ \vdots \end{bmatrix} &= 0 , \\ \underline{1}_n \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial^2 \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^* \partial P_j^*} \\ \vdots \end{bmatrix} &= -n \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \\ \vdots \end{bmatrix} , \end{aligned}$$

$$e \quad \underline{1}_n \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial^2 \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^* \partial P_j^*} \\ \vdots \end{bmatrix} \cdot \underline{1}_n' = 0.$$

Neste ponto, a aproximação para a esperança "bootstrap" pode ser conseguida por

$$E_*[\hat{T}_n^*(P^*)] \doteq \hat{T}_n^*(\underline{1}_n/n) + \frac{1}{2} \text{tr} \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial^2 \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^* \partial P_j^*} \\ \vdots \end{bmatrix} [I_n/n^2 - \underline{1}_n \underline{1}_n'/n^3]$$

$$E_*[\hat{T}_n^*(P^*)] \doteq \hat{T}_n^*(\underline{1}_n/n) + \frac{1}{2n^2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^* \partial P_j^*} . \quad (1.8)$$

Já a aproximação para a variância "bootstrap" é

$$V_*[\hat{T}_n^*(P^*)] \doteq \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \\ \vdots \end{bmatrix} [I_n/n^2 - \underline{1}_n \underline{1}_n'/n^3] \cdot \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$V_*[\hat{T}_n^*(P^*)] \doteq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \hat{T}_n^*(P^*)}{\partial P_i^*} \right]^2 . \quad (1.9)$$

Finalmente pode-se observar que as expressões dadas em (1.8) e (1.9) correspondem ao vício e a variância de $\hat{T}_n^*(P^*)$ quando se usa o procedimento "Jackknife", conforme Efron em [1] e Miller em [9].

1.1.3 AS APLICAÇÕES DO "BOOTSTRAP"

1.1.3.1 Aplicações na análise estatística em geral

Muitos artigos têm surgido ultimamente tratando de aplicações do procedimento "bootstrap". Alguns se situam somente na aplicação específica, sem fazer comparação com a metodologia clássica; outros envolvem também a aferição da performance dos métodos. Alguma coisa tem sido feita na área da Bioestatística e aí é interessante destacar o trabalho de Wahrendorf e Brown "Bootstrapping a Basic Inequality in the Analysis of Joint Action of Two Drugs" [11]. Rubin em [7] estuda o "bootstrap" no contexto da Inferência Bayseana. Ali, a intenção é de ao invés de estimar a distribuição amostral de uma estatística, usar o "bootstrap" Bayseano para simular a distribuição a posteriori com determinado parâmetro; assim, se $\hat{T}_n(\underline{x})$ estima o funcional $T_n(F)$, em cada replicação do "bootstrap" Bayseano calcula-se $T_n(\underline{x})$ como se $\underline{f}_i \in \underline{f} = [f_1, f_2, \dots, f_n]'$ fosse a probabilidade de $X_i = x_i$ com f_i fixada, a partir da ordenação de $n - 1$ observações $U(0,1)$, na diferença $u_{(i)} - u_{(i-1)}$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, com $u_{(0)} = 0$ e $u_{(n)} = 1$; desta forma $\underline{f} = [f_1, f_2, \dots, f_n]'$ é o vetor das probabilidades para se reamostrar os dados da amostra original $\underline{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]'$. Para todas as replicações do "bootstrap" Bayseano, a distribuição .. "bootstrap" Bayseana da estatística $\hat{T}_n(\underline{s})$ são os valores $\hat{T}_n^*(\underline{x}^*)$.

Efron, estudou a aplicação do "bootstrap" na estimação da taxa de erro na Análise Discriminante, estimação da mediana de uma distribuição F desconhecida, e estatística de Wilcoxon, no seu artigo [1]; e ainda, aplicação do "bootstrap" em dados censurados, na estimação robusta, e em "cross-validation", em [5]. Ainda Efron, em [12], aborda de forma quase exaustiva a estimativa "bootstrap" do coeficiente de correlação; mostra que a sua técnica

ca pode ser usada na obtenção de estimativa da variabilidade de componentes principais sem a suposição de normalidade para os dados; cita uma aplicação do "bootstrap" [13] em situação onde o estimador estatístico não é um número, ou melhor em um conjunto de dados sobre o pH da chuva registrados por nove estações meteorológicas americanas e usados para o desenho de curvas de nível do pH da região pelo método Kriging. O desenho "bootstrap" revelou informações antes não percebidas no mapa originalmente construído com os dados de pH, mostrando 'contrações em corredores de acidez relativamente baixa ou relativamente alta, as vezes até estrangulando o corredor e isolando regiões.

Como se percebe do exposto, as aplicações do "bootstrap" estão ocorrendo de forma rápida e variada. Contudo, o "bootstrap" não garante uma visão verdadeira da precisão estatística da estimativa amostral. Conseguiu-se, porém, demonstrar que o "bootstrap" dá muitas vezes uma boa visão dessa precisão estatística. É evidente que existem algumas situações amostrais onde o "bootstrap" não funciona, mas isto não é percebido a "priori". Como diz Efron, nos seus artigos, um caso assim não pode ser classificado como má performance do método, mas sim como uma condição da incerteza que se apresenta em toda análise estatística.

1.1.3.2 Aplicações na análise de regressão

Efron, não só inventou o "bootstrap", como também tem investigado de forma incansável as possíveis aplicações da técnica. A Análise de Regressão mereceu uma pesquisa inicial sua,

publicada em 1979 [1]. Nesse artigo, é feita a descrição de forma clara e detalhada do emprego da técnica em modelos de regressão. Depois, dois excelentes artigos foram publicados por Freedman explorando o "bootstrap" na regressão. Em 1981, apresentou "Bootstrapping regression models" [6] e em 1984 surgiu, em parceria com Peters, "Bootstrapping a regression equation: some empirical results" [8], o qual é citado em exemplo por Efron em [12].

De forma geral estes artigos abordam muito bem a aplicação do método em regressão, sendo que em [6] Fredman conduz toda a argumentação teórica, e afirma que a aplicação do "bootstrap" é válida, embora sob condições moderadas em certos modelos, e ainda que a aplicação maior na área, parece ser no caso de resultados assintóticos. Logo, Mínimos Quadrados Generalizados com matriz de covariância estimada, modelos com variáveis defasadas, erros não normais, são os problemas de regressão onde o "bootstrap" independentemente da distribuição dos resíduos, poderá ser aplicado para estimação da variabilidade de estatísticas e outras inferências. Conquanto cada uma destas aplicações mereça um estudo detalhado, é certo que em futuro muito próximo muitos casos da análise de regressão estarão completamente investigados pelos estudiosos da computação intensiva.

Quanto a metodologia em si, pode ser detalhada do modo seguinte: seja o modelo

$$\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$$

onde \underline{Y} é o vetor de respostas, $\underline{\varepsilon}$ o vetor de erros (ambos com dimensão n), $\underline{\beta}$ vetor de parâmetros com dimensão p e X a matriz do modelo de ordem $(n \times p)$ e não aleatória. Os erros são iid com distribuição desconhecida F e assume-se que F está centrada em zero de alguma forma. Assim,

$$\varepsilon_i \sim \text{iid}^F \quad \text{com} \quad E_F(\varepsilon_i) = 0.$$

Com a matriz X , conhecida, e dispondo-se da amostra aleatória $\underline{Y}' = [y_1, y_2, y_3, \dots, y_n]$, usa-se algum método de ajustamento (p.ex. mínimos quadrados), faz-se um ajuste e obtém-se $\underline{\hat{\beta}}$ como estimativa do vetor de parâmetros,

$$\underline{\hat{\beta}} = (X' X)^{-1} X' \underline{Y}.$$

O vetor dos resíduos \underline{e} fica determinado por

$$\underline{e} = \underline{Y} - X \underline{\hat{\beta}}.$$

A distribuição empírica de probabilidade \hat{F} , para os resíduos corrigidos pela média, é estabelecida e associa a probabilidade n^{-1} para cada ponto residual e_i ,

$$e_i \sim \text{iid}^{\hat{F}}.$$

Então a amostra "bootstrap", \underline{e}^* de tamanho n , é extraída de \hat{F} ,

$$\underline{e}^* = (e_1^*, e_2^*, e_3^*, \dots, e_n^*)',$$

constroem-se o vetor de pseudo-dados \underline{Y}^* , com

$$\underline{Y}^* = X\hat{\underline{\beta}} + \underline{e}^* .$$

Faz-se neste ponto, um novo ajustamento, agora às pseudo-respostas, e a estimativa "bootstrap" $\hat{\underline{\beta}}^*$ de $\underline{\beta}$ é determinada pelo mesmo critério de ajustamento,

$$\hat{\underline{\beta}}^* = (X' X)^{-1} X' \underline{Y}^* .$$

Repetindo-se o processo a partir da amostra original de resíduos \underline{e} , um número n^* de vezes, consegue-se o conjunto

$$\{\hat{\underline{\beta}}^*_1, \hat{\underline{\beta}}^*_2, \hat{\underline{\beta}}^*_3, \dots, \hat{\underline{\beta}}^*_{n^*}\}$$

que é uma aproximação da distribuição "bootstrap" de $\hat{\underline{\beta}}^*$, que por sua vez é uma estimativa "bootstrap" da verdadeira distribuição amostral de $\hat{\underline{\beta}}$. Por outro lado, o princípio "bootstrap" visto anteriormente, é de que a distribuição de $\sqrt{n} (\hat{\underline{\beta}}^* - \hat{\underline{\beta}})$ faz uma aproximação da distribuição de $\sqrt{n} (\hat{\underline{\beta}} - \underline{\beta})$. Sendo que esta aproximação é realmente muito boa quando se tem n suficientemente grande e σ^2 . p. tr $(X' X)^{-1}$ pequeno, pois o teorema 2.1 de [6] garante que

$$d_2^p \{ \Psi_n(F), \Psi_n(G) \}^2 \ll n \cdot \text{tr} \{ X' X \}^{-1} \cdot d_2(F, G)^2,$$

onde $\Psi_n(F)$ é a lei de $\sqrt{n} \cdot [X' X]_n^{-1} \cdot \underline{\varepsilon}_n$, F é a distribuição comum dos ε_i , G é definida do mesmo modo, d_2 é a métrica de Mallows e, p a dimensão do espaço linear. Deste modo denotando-se por F_n a função distribuição empírica dos erros

$\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$; \hat{F}_n a empírica dos resíduos $\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$; centrada na média; a distância entre \hat{F}_n e F_n é dada por $d_2(\hat{F}_n, F_n)^2$ que corresponde ao ínfimo de $E\{(\varepsilon - \varepsilon)^2\}$ para toda distribuição conjunta do par de v.a.'s $(\varepsilon, \varepsilon)$ cujas distribuições marginais são \hat{F}_n e F_n , respectivamente. Então, usando-se o lema 2.1 de [6],

$$E\{d_2(\hat{F}_n, F_n)^2\} \leq \sigma^2 \cdot p/n,$$

tem-se que para $\Psi_n(F_n)$ a distribuição de $\sqrt{n}(\hat{\beta} - \beta)$ com F_n sendo a lei de $\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$ e $\Psi_n(\hat{F}_n)$ a distribuição de $\sqrt{n}(\hat{\beta}^* - \hat{\beta})$ com \hat{F}_n sendo a lei de $\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$ a esperança da distância entre as distribuições é:

$$E\{d_2^p[\Psi_n(\hat{F}_n), \Psi_n(F_n)]\} \leq n \cdot \text{tr}(X'X)^{-1} E[d_2(\hat{F}_n, F_n)^2]$$

$$E\{d_2^p[\Psi_n(\hat{F}_n), \Psi_n(F_n)]\} \leq n \cdot \text{tr}(X'X)^{-1} \cdot \sigma^2 \cdot p/n$$

donde

$$E\{d_2^p[\Psi_n(\hat{F}_n), \Psi_n(F_n)]\} \leq \sigma^2 p \cdot \text{tr}(X'X)^{-1}$$

e portanto as distâncias entre as distribuições de $\sqrt{n}(\hat{\beta}^* - \hat{\beta})$ e de $\sqrt{n}(\hat{\beta} - \beta)$ é menor a medida que $\sigma^2 \cdot p \cdot \text{tr}(X'X)^{-1}$ diminua de valor, aproximando-se cada vez mais uma da outra, coincidindo para um valor de $\sigma^2 \cdot p \cdot \text{tr}(X'X)^{-1}$ infinitamente baixo.

O vetor "bootstrap" $\hat{\beta}^* = (X'X)^{-1} X' Y^*$ tem média "bootstrap" dada por $\hat{\beta}$ e matriz de covariância "bootstrap" $\hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$. Este vetor e esta matriz são apresentados por Efron em [1], mas um detalhamento é necessário. Assim, por definição, a esperança "bootstrap" de $\hat{\beta}^*$ é

$$E_*(\hat{\beta}^*) = E_*[(X'X)^{-1}X'Y^*] = (X'X)^{-1}X'E_*(Y^*)$$

$$E_*(\hat{\beta}^*) = (X'X)^{-1}X' \cdot E_*(X\hat{\beta} + \underline{e}^*)$$

$$E_*(\hat{\beta}^*) = (X'X)^{-1}X' \cdot (X\hat{\beta} + \underline{0})$$

$$E_*(\hat{\beta}^*) = \hat{\beta} \quad (1.10)$$

e variância "bootstrap" igual a

$$V_*(\hat{\beta}^*) = E_*(\hat{\beta}^* - \hat{\beta})(\hat{\beta}^* - \hat{\beta})'$$

segue que

$$\begin{aligned} V_*(\hat{\beta}^*) &= E_*[(X'X)^{-1}X'(\underline{X}\hat{\beta} + \underline{e}^* - \underline{X}\hat{\beta} - \underline{\epsilon})((X'X)^{-1}X'(\underline{X}\hat{\beta} + \underline{e}^* - \underline{X}\hat{\beta} - \underline{\epsilon}))'] \\ &= E_*[(\hat{\beta} + (X'X)^{-1}X'\underline{e}^* - \hat{\beta} - (X'X)^{-1}X'\underline{\epsilon})(\hat{\beta} + (X'X)^{-1}X'\underline{e}^* - \hat{\beta} - (X'X)^{-1}X'\underline{\epsilon})'] \\ &= E_*[(\hat{\beta} + (X'X)^{-1}X'\underline{e}^* - \hat{\beta})(\hat{\beta} + (X'X)^{-1}X'\underline{e}^* - \hat{\beta})'] \\ &= E_*[(X'X)^{-1}X'\underline{e}^*\underline{e}^{*'}X(X'X)^{-1}] \\ V_*(\hat{\beta}^*) &= [(X'X)^{-1}X'E_*(\underline{e}^*\underline{e}^{*'})X(X'X)^{-1}] \end{aligned} \quad (1.11)$$

e uma vez que

$$e^*_i \sim \text{iid } \hat{F} \quad \text{com} \quad E(e^*_i) = 0,$$

e

$$\begin{aligned} V(e^*_i) &= E(e^*_i - 0)^2 = E(e^*_i)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (e^*_i)^2 \\ V(e^*_i) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - g(\hat{\beta})]^2 = \hat{\sigma}^2 \end{aligned}$$

tem-se que

$$E_* (\underline{e}^* \underline{e}^{*'}) = \hat{\sigma}^2 \cdot I_n \quad (1.12)$$

e finalmente, voltando a expressão (1.11), conclui-se que a va-riância de $\underline{\hat{\beta}}^*$ é dada por

$$\begin{aligned} V_* (\underline{\hat{\beta}}^*) &= (X'X)^{-1} X' \hat{\sigma}^2 \cdot I_n \cdot X(X'X)^{-1} \\ V_* (\underline{\hat{\beta}}^*) &= \hat{\sigma}^2 \cdot (X'X)^{-1} \end{aligned} \quad (1.13)$$

O resultado na expressão (1.13) mostra que a variância do estimador "bootstrap" do vetor $\underline{\beta}$ é igual a variância do estimador $\underline{\hat{\beta}}$, não viciado, quando se estima σ^2 por $\hat{\sigma}^2$.

1.2 MÍNIMOS QUADRADOS GENERALIZADOS COM MATRIZ DE COVARI- ÂNCIA ESTIMADA

1.2.1 ENFOQUE GERAL DO PROBLEMA E DO MÉTODO

Seja o modelo $\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$, onde se considera o vetor de perturbação estocástica $\underline{\varepsilon}$ com média $E(\underline{\varepsilon}) = \underline{0}$ e matriz ' de covariância $V(\underline{\varepsilon}) = \Sigma$. Se Σ é conhecida (uma situação ' difícil de ocorrer) o estimador do parâmetro $\underline{\beta}$ é dado por

$$\underline{\hat{\beta}}_{mqg} = (X' \Sigma^{-1} X)^{-1} X' \Sigma^{-1} \underline{Y} \quad (1.14)$$

que é UMVU. Mas, quando Σ é desconhecida (situação que

ocorre geralmente) o que se costuma fazer é aplicar um procedimento em dois estágios. Na primeira fase os estatísticos procuram uma matriz, $\hat{\Sigma}$, que seja consistente na estimação de Σ . Para isto, é feito um ajuste preliminar por mínimos quadrados ordinários, obtendo-se o vetor de resíduos \underline{e}_0 . Poder-se-ia pensar em usar $\hat{\Sigma}$ como sendo a matriz $\underline{e}_0 \cdot \underline{e}_0'$, entretanto este procedimento não pode ser adotado, pois $\underline{e}_0 \cdot \underline{e}_0'$ é singular. Então, o indicado é fazer alguma hipótese sobre a forma da estrutura de covariância dos erros ε_i . Supondo que a estrutura de covariância seja a de uma auto-regressão de 1ª ordem, p.ex., assume-se

$$e_{0,i} = \rho \cdot e_{0,i-1} + u_i \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

com u_i sendo o erro aleatório. E, fazendo-se uma regressão por mínimos quadrados de e_i contra e_{i-1} obtem-se o estimador $\hat{\rho}$ de ρ . Na segunda fase do processo, obtem-se $\hat{\Sigma}_0$ um estimador para Σ , baseado nos resíduos \underline{e}_0 e calcula-se

$$\hat{\beta}_{mqg}^{(1)} = (X' \hat{\Sigma}_0^{-1} X)^{-1} X' \hat{\Sigma}_0^{-1} Y$$

no chamado 1º estágio. Em seguida calcula-se

$$\underline{e}_1 = Y - X \hat{\beta}_{mqg}^{(1)}$$

e o procedimento prossegue de modo iterativo até um número definido de repetições, ou até que o vetor $\hat{\beta}_{mqg}^{(K)}$ estabilize-se no estágio K , em $\hat{\Sigma}_{K-1} = \hat{\Sigma}$. Desde que o vetor $\underline{\varepsilon}$ seja independente de X e distribuído conforme uma normal multivariada

de média $\underline{\theta}$ é possível provar que $\hat{\beta}_{mqg}^{(k)}$ converge para o estimador de máxima verossimilhança de $\underline{\beta}$. Mas, o emprego deste método é válido apenas assintoticamente. Em situações onde o tamanho da amostra seja finito, é claro que um bom resultado dependerá de $\hat{\Sigma}$ ser uma boa estimativa de Σ . Ocorre ' em muitas situações de amostra finita o uso de técnicas assintóticas e os erros-padrão obtidos de

$$V(\hat{\beta}_{mqg}^{(k)}) = (X' \Sigma_{k-1} X)^{-1}$$

poderão ser, como nota Freedman em [6], indevidamente otimistas. O aumento de iterações para um estágio $K > 1$ poderá ' melhorar a precisão de $\hat{\beta}_{mqg}^{(k)}$, mas em contra-partida pode tornar as estimativas do erro-padrão mais otimistas.

II. EXPERIMENTO COM n REPLICAÇÕES EM CADA PONTO EXPERIMENTAL. AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS.

II.1 DESCRIÇÃO DA SITUAÇÃO BÁSICA DO EXPERIMENTO

Seja o experimento onde se faz n repetições em cada um de k tratamentos. Os princípios básicos do Planejamento Experimental, aleatoriedade e replicação das unidades experimentais, são usados no sentido de garantir suposições fundamentais à aplicação de certos procedimentos estatísticos. Contudo, ocorrem situações em que o experimento não segue de perto estas premissas básicas, ora por desconhecimento do experimentador, ora por impossibilidade técnica. O caso que se aborda neste trabalho, é aquele em que k unidades experimentais foram aleatorizadas e aplicou-se os k tratamentos, um em cada unidade experimental; sendo que em cada ponto experimental $i, i = 1, 2, \dots, k$, se faz n replicações do tratamento i em n unidades observacionais oriundas da mesma unidade.

Assim, embora as unidades experimentais estejam aleatorizadas, o mesmo não ocorre com as unidades observacionais e portanto uma correlação ρ entre as replicações pode estar sendo criada.

Esta situação experimental, descrita, foi a na qual se baseou a linha de raciocínio deste trabalho. Existem outras situações em que a correlação entre replicações ocorre naturalmente. São particularmente interessantes as de origem bioló-

gica citadas por Bartlett [16].

II.2 O MODELO DO AJUSTE DA SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS

Seja o experimento conforme descrito em 2.1, definido pela matriz do modelo X de ordem $(kn \times p)$, a seguir, com a qual se pretende ajustar a superfície de respostas¹

$$\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}, \quad (2.1)$$

onde

$${}_{kn}^X_p = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1,p-1} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2j} & \dots & x_{2,p-1} \\ 1 & x_{31} & x_{32} & \dots & x_{3j} & \dots & x_{3,p-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_k & x_{k2} & \dots & \dots & \dots & x_{k,p-1} \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \otimes \underline{1}_n \quad i = 1, 2, 3, \dots, k \\ \\ j = 1, 2, 3, \dots, p-1 \end{matrix}$$

e pode ser escrita como:

$${}_{kn}^X_p = {}_k^X_p \otimes \underline{1}_n \quad (2)$$

¹ Abordagem típica de superfície de resposta está em 3.1.

² \otimes é o produto de Kronecker.

O vetor de respostas \underline{Y} , de dimensão kn , é:

$$\underline{Y}' = [y_1, y_2, \dots, y_{kn}],$$

o vetor de parâmetros do modelo ajustado é:

$$\underline{\beta}'_0 = [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{p-1}]$$

e o vetor aleatório de erros $\underline{\varepsilon}$, de dimensão kn , pode ser escrito como

$$\underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \varepsilon_k \end{bmatrix} \otimes \underline{1}_n.$$

A matriz do modelo $kn \times p$ é fixa, cada componente de $\underline{\varepsilon}$ é tal que

$$E(\varepsilon_i) = 0 \quad \text{e} \quad V(\varepsilon_i) = \sigma^2 \quad i=1,2,\dots, kn$$

e ainda os erros ε_i têm distribuição comum F . Quanto a variância do vetor, considerando-se as replicações, tem-se por definição

$$V(\underline{\varepsilon}) = E[\underline{\varepsilon} - E(\underline{\varepsilon})][\underline{\varepsilon} - E(\underline{\varepsilon})]'$$

$$V(\underline{\varepsilon}) = E(\underline{\varepsilon} \cdot \underline{\varepsilon}') = \Sigma \quad \text{de ordem } (kn \times kn)$$

Mas, de acordo com a descrição do experimento, pode ser gerada correlação ρ entre as unidades observacionais obtidas nas replicações, conquanto ocorra independência entre os pontos experimentais e igualdade de variância nos k tratamentos. Assim, a matriz de covariância Σ assume a forma:

$$\Sigma_{kn} = \sigma^2 \cdot I_k \otimes E_{nn} \quad (2.2)$$

onde E_{nn} é matriz de equi-correlação de ordem $(n \times n)$, ou seja E é do tipo:

$$E = \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho & . & . & \rho \\ \rho & 1 & \rho & . & . & \rho \\ . & . & 1 & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ \rho & \rho & \rho & . & . & 1 \end{bmatrix} \text{ de ordem } (n \times n), \quad (2.3)$$

ou melhor $E = (e_{ij})$ com $e_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{p/ } i=j \\ \rho & \text{p/ } i \neq j. \end{cases}$

Da matriz de covariância Σ é possível derivar-se a matriz de correlação Σ_c , dada por:

$$\Sigma_c = I_k \otimes E_{nn} \quad (2.4)$$

II.3 ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO DA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA

II.3.1 O ESTIMADOR

Quando se está ajustando o modelo (2.1) ao delineamento descrito em 2.1 pode ocorrer do experimentador desconhecer a existência de correlação entre as replicações, supor então que a matriz de covariância seja do tipo:

$$I_{kn} \cdot \sigma^2$$

e deste modo usar o Estimador de Mínimos Quadrados Ordinários para obter estimativa do parâmetro $\underline{\beta}$,

$$\hat{\underline{\beta}}_{mqo} = (X'X)^{-1} X'Y$$

quando na verdade deveria usar, com a hipótese correta de Σ como em (2.2)

$$\Sigma_{kn} = \sigma^2 \cdot I_k \otimes I_n$$

o Estimador de Mínimos Quadrados Generalizados de $\underline{\beta}$

$$\hat{\underline{\beta}}_{mqg} = (X'\Sigma^{-1}X)^{-1} X'\Sigma^{-1}Y \quad (2.5)$$

Os dois estimadores são UMVU e se v.a. ε_j $j=1,2,\dots,kn$, é normalmente distribuída tem-se que ambos os estimadores são também de máxima verossimilhança. A seguir tem-se um resultado de interesse sobre o modelo abordado, e trata-se de um caso particular de um teorema mais geral [19]. A prova deste resultado é mantida neste trabalho por duas razões:

- (i) o resultado surgiu originalmente e naturalmente da análise do modelo, bem como a sua prova;
- (ii) o resultado não é fácil de encontrar na literatura estatística (o autor deste trabalho o desconhecia).

RESULTADO 1: Seja o delineamento com n replicações em cada um dos k pontos experimentais, conforme descrito em 2.1 e 2.2. Então,

$$\hat{\beta}_{mqo} = \hat{\beta}_{mqg}$$

PROVA:

O estimador de mínimos quadrados generalizados do vetor $\underline{\beta}$ no modelo $\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$ é

$$\hat{\beta}_{mqg} = (\underline{X}'\underline{\Sigma}^{-1}\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{\Sigma}^{-1}\underline{Y}$$

e dado que

$$\underline{\Sigma}_{kn} = \sigma^2 \cdot \underline{I}_k \otimes \underline{nE}_n$$

com \underline{nE}_n definida em (2.3) tem-se que a inversa de E pode ser obtida aplicando-se a "identidade de Bartlett" [17] para uma matriz $(1 - \rho)\underline{I}_n$ de ordem $(n \times n)$ não-singular, vetor $\underline{1}$ de uns com dimensão n e escalar ρ , que é

$$[(1-\rho)\underline{I}_n + \rho\underline{1}\underline{1}']^{-1} = [(1-\rho)\underline{I}_n]^{-1} - \frac{\rho}{1 + \rho\underline{1}'[(1-\rho)\underline{I}_n]^{-1}\underline{1}} \cdot [(1-\rho)\underline{I}_n]^{-1}\underline{1}\underline{1}'[(1-\rho)\underline{I}_n]$$

Assim, uma vez que E pode ser escrita como:

$$E = (1 - \rho)\underline{I}_n + \rho\underline{1}\underline{1}'$$

segue que:

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n - \frac{\rho}{1 + \rho \cdot (1-\rho)^{-1} \underline{1}_n' I_n \underline{1}_n} \cdot \frac{1}{(1-\rho)} I_n \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n' \cdot \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n - \frac{\rho}{(1-\rho)^2 + \rho \cdot (1-\rho)^{-1} \cdot (1-\rho)^2 \cdot n} \cdot I_n \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n' \cdot I_n$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n - \frac{\rho}{(1-\rho)^2 + \rho \cdot (1-\rho)n} \cdot \underline{1}_n \cdot \underline{1}_n'$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n - \frac{\rho}{(1-\rho) [1 - \rho + \rho n]} \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n'$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot I_n - \frac{\rho}{(1-\rho) \cdot [1 + (n-1)\rho]} \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n'$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \{ I_n - \rho \cdot [1 + (n-1)\rho]^{-1} \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n' \}$$

$$E^{-1} = \frac{1}{(1-\rho)} \cdot F \tag{2.6}$$

com ${}^n F_n = (f_{ij})$ da forma

$$f_{ij} = \begin{cases} \frac{1 + (n-2)\rho}{1 + (n-1)\rho} & p/ \quad i = j \\ - \frac{\rho}{1 + (n-1)\rho} & p/ \quad i \neq j \end{cases}$$

e ainda a inversa da matriz de covariância é

$$\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} \cdot I_k \otimes E^{-1}$$

donde

$$X' \Sigma^{-1} = x' \otimes \underline{1}'_n \cdot \frac{1}{\sigma^2} \cdot I_k \otimes E^{-1}$$

com x de ordem $(k \times p)$ matriz do modelo sem replicação,

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} \cdot x' \otimes \underline{1}'_n \cdot I_k \otimes E^{-1}$$

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} \cdot (x' \cdot I_k) \otimes (\underline{1}'_n \cdot E^{-1}) \quad ,$$

substituindo E^{-1} por (2.6) obtem-se

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 (1-\rho)} \cdot x' \otimes (\underline{1}'_n \cdot n F_n)$$

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 (1-\rho)} \cdot x' \otimes \left\{ \left[\frac{1 + (n-2)\rho}{1 + (n-1)\rho} - (n-1) \frac{\rho}{1+(n-1)\rho} \right] \cdot \underline{1}'_n \right\}$$

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 (1-\rho)} \cdot x' \otimes \left\{ \frac{1 + (n-2) \cdot \rho - n\rho + \rho}{1 + (n-1)\rho} \cdot \underline{1}'_n \right\}$$

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 (1-\rho) [1 + (n-1)\rho]} \cdot x' \otimes \{(1+n\rho-2 \cdot \rho - n\rho + \rho) \underline{1}'_n\}$$

$$X' \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 (1-\rho) [1 + (n-1)\rho]} \cdot x' \otimes (1-\rho) \cdot \underline{1}'_n$$

$$X'\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 [1+(n-1)\rho]} \cdot X' \otimes \underline{1}_n$$

$$X'\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 [1+(n-1)\rho]} \cdot X' \quad (2.7)$$

e finalmente substituindo (2.7) na expressão do estimador de mínimos quadrados generalizados

$$\hat{\beta}_{mqg} = (X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}\underline{Y}$$

obtem-se

$$\hat{\beta}_{mqg} = \left(\frac{1}{\sigma^2 [1+(n-1)\rho]} \cdot X'X \right)^{-1} \frac{1}{\sigma^2 [1+(n-1)\rho]} \cdot X'\underline{Y}$$

$$\hat{\beta}_{mqg} = (X'X)^{-1}X'\underline{Y} = \hat{\beta}_{mqo} \quad \text{c.q.d.}$$

De acordo com o RESULTADO 1, o experimentador que ignorasse a matriz de covariância Σ dada por (2.2) e assumisse uma independência completa entre as unidades observacionais não incorreria em erro na estimativa por ponto dos parâmetros, en tretanto no prosseguimento da análise outras inferências estatísticas estariam prejudicadas.

II.3.2 A VARIÂNCIA DO ESTIMADOR DE β

Foi apresentado em 2.3.1, o melhor estimador linear '

de $\underline{\beta}$ que é o de mínimos quadrados generalizados, cuja coincidência com o de mínimos quadrados ordinários, vem trazer alguma facilidade no trato com o modelo. Todavia a escolha da hipótese sobre a independência completa dos resíduos, um a um, pode conduzir a alguns equívocos. Se for considerada a hipótese (errônea) da matriz de covariância dos resíduos

$$I_{kn} \cdot \sigma^2 \quad ,$$

então a matriz de covariância do estimador de $\underline{\beta}$ é

$$E[(\underline{\hat{\beta}}_{mqo} - \underline{\beta})(\underline{\hat{\beta}}_{mqo} - \underline{\beta})'] = \sigma^2 (X'X)^{-1} \quad ,$$

e na hipótese correta, de existência de correlação, com aquela matriz dada por

$$k n \Sigma_{kn} = \sigma^2 \cdot I_k \otimes n E_n$$

tem-se a matriz de covariância de $\underline{\hat{\beta}}_{mqo}$ calculada na forma do resultado seguinte:

RESULTADO 2: Seja o delineamento com n replicações em cada um dos k pontos experimentais, conforme descrito em 2.1 e 2.2. Então a matriz de covariância do estimador $\underline{\hat{\beta}}_{mqg}$ do parâmetro $\underline{\beta}$ é dada por:

$$E[(\underline{\hat{\beta}}_{mqg} - \underline{\beta})(\underline{\hat{\beta}}_{mqg} - \underline{\beta})'] = \sigma^2 [1 + (n-1) \cdot \rho] (X'X)^{-1} \quad (2.8)$$

PROVA

$$\begin{aligned}
 E[(\hat{\beta}_{mqg} - \beta)(\hat{\beta}_{mqg} - \beta)'] &= E\{[(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}Y - \beta][(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}Y - \beta]'\} \\
 &= E\{[(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}(X\beta + \varepsilon) - \beta][(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1} \cdot \\
 &\quad \cdot (X\beta + \varepsilon) - \beta]'\} \\
 &= E\{[\beta + (X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}\varepsilon - \beta][\beta + (X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}\varepsilon - \beta]'\} \\
 &= E\{[(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}\varepsilon][\varepsilon'\Sigma^{-1}X(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}]\} \\
 &= [(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}]E(\varepsilon\varepsilon')[\Sigma^{-1}X(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}] \\
 &= [(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}X'\Sigma^{-1}]\Sigma[\Sigma^{-1}X(X'\Sigma^{-1}X)^{-1}] \\
 &= (X'\Sigma^{-1}X)^{-1}
 \end{aligned}$$

mas usando-se (2.7) da prova anterior tem-se

$$\begin{aligned}
 E[(\hat{\beta}_{mqg} - \beta)(\hat{\beta}_{mqg} - \beta)'] &= \left(\frac{1}{\sigma^2[1+(n-1)\rho]}\right) X'X)^{-1} \\
 &= \sigma^2[1+(n-1)\rho] (X'X)^{-1} \quad \text{c.q.d.}
 \end{aligned}$$

Deste resultado é fácil perceber, que quando σ^2 e ρ são desconhecidos, um estimador da matriz (2.8) depende de estimativas independentes de σ^2 e ρ .

II.4 RESÍDUOS ORIUNDOS DE UM ÚNICO AJUSTE MQO PARA AS N * REPLICAÇÕES

II.4.1 O FATOR DE CORREÇÃO DOS RESÍDUOS

No ajuste de um modelo de superfície de resposta aos dados de um determinado delineamento,

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon} \quad \text{ou}$$

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_{p-1} x_{ip-1} + \varepsilon_i,$$

$$i = 1, 2, \dots, n,$$

pode-se obter estimativa não viciada da variância populacional σ^2 usando-se os resíduos do ajustamento,

$$\hat{\varepsilon} = \underline{Y} - \hat{\underline{Y}}$$

desde que os resíduos sejam pré-multiplicados por um fator de correção que venha recompor a perda dos graus de liberdade ocasionada pelo ajuste. Quando se está diante do modelo clássico de regressão, com $X'X$ de posto completo igual a p ,

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon} \quad \text{com}$$

$$E(\underline{\varepsilon}) = \underline{0} \quad \text{e} \quad V(\underline{\varepsilon}) = I_n \sigma^2$$

onde a estimação do parâmetro $\underline{\beta}$ é feita por mínimos quadrados ordinários, o fator de correção adequado é

$$\sqrt{\frac{n}{n-p}}.$$

Portanto a estimativa não viciada de σ^2 é $s^2 = \frac{1}{n-p} \cdot \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$

pois

$$E\left(\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2\right) = (n-p)\sigma^2.$$

Mas, defronte a situações mais complexas, o fator de correção dos resíduos não é tão simples. Na referência [8] ' D.A.Freedman comenta este fato, observando que nem sempre a escolha do fator de correção é clara.

Para o modelo estudado neste trabalho, determinou-se o fator de correção para os resíduos, correlacionados, gerados ' pelo ajuste do modelo (2.1) que está descrito em 2.1 e 2.2. Assim, o fator de correção dos resíduos oriundos de um ajuste' por mínimos quadrados ordinários (MQO) do modelo 2.1 é dado pe lo resultado seguinte.

RESULTADO 3: Seja o delineamento com replicação conforme descrito em 2.1 e 2.2. O fator de correção dos graus de liberdade que deve ser aplicado aos resíduos quando estes são originados de um ajuste' por mínimos quadrados ordinários (MQO), a fim de se obter estimativa não viciada da variância σ^2 é dado por

$$\phi = \sqrt{\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p}} \quad (2.9)$$

PROVA

Supondo que os resíduos são obtidos de ajuste por MQO, logo admitindo que a matriz de covariância seja $I_{kn} \cdot \sigma^2$ e conseqüentemente $\hat{\underline{Y}} = X \hat{\underline{\beta}}_{mqo}$, tem-se que a soma dos quadrados dos resíduos é

$$SQR = \sum_{i=1}^{kn} \hat{\epsilon}_i^2 = \underline{Y}' \underline{Y} - \hat{\underline{\beta}}' X' \underline{Y}$$

e a sua esperança é dada por

$$\begin{aligned} E(SQR) &= E\left(\sum_{i=1}^{kn} \hat{\epsilon}_i^2\right) = E(\hat{\underline{\epsilon}}' \hat{\underline{\epsilon}}) = E[(\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})' \cdot (\underline{Y} - \hat{\underline{Y}})] \\ &= E[(\underline{Y} - X \hat{\underline{\beta}})' \cdot (\underline{Y} - X \hat{\underline{\beta}})] \\ &= E[(\underline{Y} - X(X'X)^{-1}X' \underline{Y})' (\underline{Y} - X(X'X)^{-1}X' \underline{Y})] \\ &= E[\underline{Y}' \underline{Y} - \underline{Y}' X(X'X)^{-1}X' \underline{Y}] \\ &= E\{\underline{Y}' [I_{kn} - X(X'X)^{-1}X'] \underline{Y}\} \end{aligned}$$

mas, como a expressão entre chaves é como forma quadrática e sendo $\underline{Y} \sim (X \underline{\beta}, \Sigma)$ por ([20], p.55) tem-se:

$$\begin{aligned} E(SQR) &= \text{tr} \{ \Sigma [I_{kn} - X(X'X)^{-1}X'] \} + \hat{\underline{\beta}}' X' [I_{kn} - X(X'X)^{-1}X'] X \hat{\underline{\beta}} \\ &= \text{tr} \{ \Sigma - \Sigma \cdot X(X'X)^{-1}X' \} + 0 \end{aligned}$$

$$= \text{tr}(\Sigma) - \text{tr}[X(X'X)^{-1}X' \cdot \Sigma]$$

mas como $X'\Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma^2 [1 + (n-1)\rho]} X'$

tem-se que $X'\Sigma = \sigma^2 [1 + (n-1)\rho] X'$

e portanto

$$\begin{aligned} E(\text{SQR}) &= \text{tr}(\Sigma) - \text{tr}[X(X'X)^{-1}\sigma^2 [1+(n-1)\rho] X'] \\ &= \sigma^2 \text{tr}(\Sigma_C) - \sigma^2 \cdot [1+(n-1)\rho] \cdot \text{tr}[X(X'X)^{-1}X'] \end{aligned}$$

com Σ_C definido conforme (2.4), e assim

$$E(\text{SQR}) = \sigma^2 \cdot kn - \sigma^2 \cdot [1+(n-1)\rho] \cdot p$$

$$E(\text{SQR}) = [kn - (1 + (n-1)\rho)p] \sigma^2 ,$$

finalmente $E\left(\frac{\text{SQR}}{kn - p}\right) = \frac{[kn - (1 + (n-1)\rho)p] \sigma^2}{kn - p}$

de modo que

$$\phi = \sqrt{\frac{kn - p}{kn - [1 + (n-1)\rho]p}} \quad \text{c.q.d.}$$

II.4.2 O ESTIMADOR NÃO VICIADO PARA A VARIÂNCIA σ^2

A determinação de um estimador não viciado para o pa-

râmetro σ^2 é quase que imediata quando se conta com o resultado 3, assim tem-se a seguir um resultado que é uma consequência do obtido anteriormente.

RESULTADO 4: Nas condições do resultado 3, o estimador não viciado de σ^2 é dado por

$$\hat{\sigma}^2 = \left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right] \cdot s^2 \quad (2.10)$$

quando $\underline{\varepsilon}$ possui uma distribuição normal ou não; e a variância desta estatística quando $\underline{Y} \sim N_{kn}(X\underline{\beta}, \Sigma)$ é dada por:

$$V(\hat{\sigma}^2) = \frac{2 \{ kn [1 + (n-1)\rho^2] - p [(1-\rho)^2 + n\rho(\rho(n-2)+2)] \}}{\{ kn - [1 + (n-1)\rho] p \}^2} \sigma^4 \quad (2.11)$$

e com $s^2 = \frac{1}{kn - p}$ SQR obtido dos resíduos $\varepsilon_i, i=1,2,\dots,kn$, oriundos de um ajuste por MQO.

PROVA

Para que $\hat{\sigma}^2$ seja não viciado para estimar σ^2 a condição é que $E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$, assim

$$E(\hat{\sigma}^2) = E\left(\left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right] \cdot s^2 \right)$$

$$E(\hat{\sigma}^2) = \left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right] \cdot E(s^2)$$

$$E(\hat{\sigma}^2) = \frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \cdot E\left[\frac{SQR}{kn - p}\right],$$

e a esperança do 2º fator no 2º membro é

$$E\left(\frac{SQR}{kn - p}\right) = \frac{1}{kn - p} \cdot E(SQR) = \frac{1}{kn - p} \cdot [kn - (1 + (n - 1) \rho) p] \sigma^2$$

que substituída na expressão de $E(\hat{\sigma}^2)$ resulta

$$E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$$

portanto a 1ª parte do resultado está demonstrada, já a variância da estatística $\hat{\sigma}^2$ é alcançada partindo-se de

$$V(\hat{\sigma}^2) = \left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right]^2 \cdot V(s^2)$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right]^2 \cdot \frac{1}{(kn - p)^2} \cdot V(SQR)$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \left[\frac{kn - p}{kn - [1 + (n - 1) \rho] p} \right]^2 \cdot \frac{1}{(kn - p)^2} \cdot V[\underline{Y}'\underline{Y} - \underline{\beta}'\underline{X}'\underline{Y}]$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{ kn - [1 + (n - 1) \rho] p \}^{-2} \cdot V\{\underline{Y}'\underline{Y} - [(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{Y}]\underline{X}'\underline{Y}\}$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{ kn - [1 + (n - 1) \rho] p \}^{-2} \cdot V\{\underline{Y}'\underline{Y} - \underline{Y}'\underline{X}(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{Y}\}$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{ kn - [1 + (n - 1) \rho] p \}^{-2} \cdot V\{\underline{Y}' [\underline{I}_{kn} - \underline{X}(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'] \underline{Y}\},$$

a expressão $\underline{Y}' [\underline{I}_{kn} - \underline{X}(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'] \underline{Y}$ é uma forma quadrática e

admitindo-se a normalidade para $\underline{\varepsilon}$ (que é o caso mais comum), tem-se que \underline{Y} também terá distribuição normal com vetor de médias $\underline{\mu} = E(\underline{Y}) = X\underline{\beta}$ com dimensão kn e matriz de covariância $kn \times kn$, $\underline{Y} \sim N_{kn}(\underline{\mu}, \Sigma)$, portanto por [17] segue

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^{-2} \cdot 2\text{tr}[(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X')\Sigma]^2 + \\ + 4 \cdot (X\underline{\beta})' [I_{kn} - X(X'X)^{-1}X']\Sigma [I_{kn} - X(X'X)^{-1}X'] \cdot X\underline{\beta}$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^{-2} \cdot 2\text{tr}[(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X')\Sigma]^2 + \\ + 4 \cdot [(X\underline{\beta})' - (X\underline{\beta})'X(X'X)^{-1}X']\Sigma [X\underline{\beta} - X(X'X)^{-1}X'X\underline{\beta}]$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^{-2} \cdot 2\text{tr}[(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X')\Sigma]^2 + 0,$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = \{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^{-2} \cdot 2\text{tr}[(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X') \cdot \sigma^2 \cdot (I_k \otimes E)]^2$$

$$V(\hat{\sigma}^2) = 2\sigma^4 \cdot \{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^{-2} \cdot \text{tr}[(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X') \cdot \\ \cdot (I_k \otimes E)]^2 \quad (2.12)$$

o traço t da matriz resultante do quadrado do colchete é obtido do desenvolvimento seguinte:

$$t = \text{tr} \{ [(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X') \cdot (I_k \otimes E)] \cdot [(I_{kn} - X(X'X)^{-1}X') \cdot (I_k \otimes E)] \} = \\ t = \text{tr} [(I_k \otimes E) \cdot (I_k \otimes E) - X(X'X)^{-1}X' \cdot (I_k \otimes E) \cdot (I_k \otimes E) - (I_k \otimes E) \cdot \\ \cdot X(X'X)^{-1}X' (I_k \otimes E) + X(X'X)^{-1}X' \cdot (I_k \otimes E) \cdot X(X'X)^{-1}X' \cdot (I_k \otimes E)], \quad (2.13)$$

denotando as 4 parcelas do colchete por A, B, C e D, tem-se

$$t = \text{tr} \left[A - B - C + D \right]$$

e isoladamente tem-se

$$\cdot \text{tr} A = \text{tr} [(I_k \otimes E) \cdot (I_k \otimes E)] = \sum_{i=1}^{kn} [1 + (n-1) \rho^2] = kn [1 + (n-1) \rho^2]$$

para B o traço é obtido partindo-se de

$$\cdot \text{tr} B = \text{tr} [\bar{X}(X'X)^{-1} X' (I_k \otimes E) \cdot (I_k \otimes E)] = \text{tr} \{ X(X'X)^{-1} X' \cdot [I_k \otimes (E \cdot E)] \}$$

$$\text{tr} B = \text{tr} \{ (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n) [(\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)' (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)]^{-1} \cdot (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)' \cdot [I_k \otimes (E \cdot E)] \}$$

$$\text{tr} B = \text{tr} \{ (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n) [(\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)' \cdot (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)]^{-1} \cdot (\mathbf{x}' \otimes \mathbf{1}_n') \cdot [I_k \otimes (E \cdot E)] \}$$

$$\text{tr} B = \text{tr} \{ (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n) [(\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)' \cdot (\mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_n)]^{-1} \cdot (\mathbf{x}' \cdot I_k) \otimes [\mathbf{1}_n' (E \cdot E)] \} , \quad (2.14)$$

mas a matriz E pode ser escrita como

$$E = (1 - \rho) I_n + \rho \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' ;$$

donde então E.E resulta

$$E \cdot E = (1 - \rho)^2 I_n + \rho(1 - \rho) \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' + (1 - \rho) \rho \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' + \rho^2 (\mathbf{1}_n \mathbf{1}_n') (\mathbf{1}_n \mathbf{1}_n')$$

$$E \cdot E = (1 - \rho)^2 I_n + 2\rho(1 - \rho) \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' + \rho^2 \cdot n \cdot \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'$$

$$E \cdot E = (1 - \rho)^2 I_n + [n\rho^2 - 2\rho^2 + 2\rho] \cdot \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'$$

$$E \cdot E = (1 - \rho)^2 I_n + [(n-2) \rho^2 + 2\rho] \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'$$

e assim o produto $\underline{1}'_n \cdot (E.E)$ existente em (2.14) é igual a

$$\begin{aligned}
 [\underline{1}'_n \cdot (E.E)] &= \underline{1}'_n \cdot \{(1-\rho)^2 I_n + [(n-2)\rho^2 + 2\rho]\underline{1}_n\underline{1}'_n\} \\
 &= (1-\rho)^2 \cdot \underline{1}'_n + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot \underline{1}'_n \cdot \underline{1}_n\underline{1}'_n \\
 &= (1-\rho)^2 \cdot \underline{1}'_n + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot n \cdot \underline{1}'_n \\
 &= [(1-\rho)^2 + [(n-2)\rho^2 + 2\rho]n] \cdot \underline{1}'_n
 \end{aligned}$$

então, retornando com este valor em (2.14),

$$\begin{aligned}
 \text{tr}B &= \text{tr} \{ (\times \otimes \underline{1}_n) [(\times \otimes \underline{1}_n)' \cdot (\times \otimes \underline{1}_n)]^{-1} \cdot (\times') \otimes [(1-\rho)^2 + [(n-2)\rho^2 + 2\rho]n] \cdot \\
 &\quad \cdot \underline{1}'_n \}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{tr}B &= \{(1-\rho)^2 + n [(n-2)\rho^2 + 2\rho]\} \cdot \text{tr}\{(\times \otimes \underline{1}_n) \cdot [(\times \otimes \underline{1}_n)' \cdot (\times \otimes \underline{1}_n)]^{-1} \cdot \\
 &\quad \cdot (\times \otimes \underline{1}_n)'\}
 \end{aligned}$$

como a matriz no 2º membro, da qual se quer o traço, é indempotente, o seu traço é igual ao seu posto e uma vez que $X'X$ é de posto completo, este posto é p , logo

$$\text{tr}B = \{(1-\rho)^2 + n [(n-2)\rho^2 + 2\rho]\} \cdot p$$

continuando, para a matriz C ,

$$\text{tr}C = \text{tr}[(I_k \otimes E) \cdot X(X'X)^{-1} X' \cdot (I_k \otimes E)]$$

$$\text{tr}C = \text{tr} [X(X'X)^{-1}X' (I_k \otimes E) \cdot (I_k \otimes E)] = \text{tr} \{X(X'X)^{-1}X' \cdot [(I_k \cdot I_k) \otimes (E \cdot E)]\}$$

$$\text{tr}C = \text{tr} \{X(X'X)^{-1}X' \cdot \{I_k \otimes [(1-\rho)^2 \cdot I_n + ((n-2)\rho^2 + 2\rho) \underline{1}_n \underline{1}_n']]\}$$

$$\text{tr}C = \text{tr} \{X(X'X)^{-1}X' \cdot \{(1-\rho)^2 \cdot (I_k \otimes I_n) + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot (I_k \otimes \underline{1}_n \underline{1}_n')\}\}$$

$$\begin{aligned} \text{tr}C &= (1-\rho)^2 \text{tr} [X(X'X)^{-1}X' \cdot (I_k \otimes I_n)] + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot \\ &\cdot \text{tr} [X(X'X)^{-1}X' \cdot (I_k \otimes \underline{1}_n \underline{1}_n')] \end{aligned}$$

$$\text{tr}C = (1-\rho)^2 \text{tr} \{X(X'X)^{-1} \cdot (\times \otimes \underline{1}_n)' (I_k \otimes I_n)\} + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot$$

$$\text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot (\times \otimes \underline{1}_n)' \cdot (I_k \otimes \underline{1}_n \underline{1}_n')]$$

$$\text{tr}C = (1-\rho)^2 \text{tr} \{X(X'X)^{-1} \cdot ((\times' \cdot I_k) \otimes (\underline{1}_n' \cdot I_n))\} + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot$$

$$\text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot ((\times' \cdot I_k) \otimes (\underline{1}_n' \cdot \underline{1}_n \underline{1}_n'))]$$

$$\text{tr}C = (1-\rho)^2 \text{tr} \{X(X'X)^{-1} \cdot (\times' \otimes \underline{1}_n')\} + [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot$$

$$\cdot (\times' \otimes \underline{1}_n') n]$$

$$\text{tr}C = (1-\rho)^2 \text{tr} [X(X'X)^{-1} X'] + n [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot \text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot X']$$

$$\text{tr}C = (1-\rho^2) \cdot p + n [(n-2)\rho^2 + 2\rho] \cdot p$$

$$\text{tr}C = p \cdot \{(1-\rho^2) + n [(n-2)\rho^2 + 2\rho]\}$$

por último para a matriz D

$$\text{trD} = \text{tr} [X(X'X)^{-1}X'(I_k \otimes E) \cdot X(X'X)^{-1}X'(I_k \otimes E)]$$

$$\text{trD} = \text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot (\otimes \otimes \underline{1}_n)'(I_k \otimes E) \cdot X(X'X)^{-1} \cdot (\otimes \otimes \underline{1}_n)' \cdot (I_k \otimes E)]$$

$$\text{trD} = \text{tr} [X(X'X)^{-1} \cdot ((\otimes' \cdot I_k) \otimes (\underline{1}_n' \cdot E)) \cdot X(X'X)^{-1} ((\otimes' \cdot I_k) \otimes (\underline{1}_n' \cdot E))]$$

$$\text{trD} = \text{tr} \{X(X'X)^{-1} \cdot (\otimes' \otimes \underline{1}_n') [1+(n-1)\rho] \cdot X(X'X)^{-1} (\otimes' \otimes \underline{1}_n') [1+(n-1)\rho]\}$$

$$\text{trD} = \text{tr} \{X(X'X)^{-1}X' \cdot [1+(n-1)\rho] \cdot X(X'X)^{-1} X' [1+(n-1)\rho]\}$$

$$\text{trD} = [1 + (n - 1) \rho]^2 \cdot \text{tr} (X(X'X)^{-1} X')$$

$$\text{trD} = p \cdot [1 + (n - 1) \rho]^2 \quad ;$$

e finalmente substituindo os 4 traços encontrados na expressão

$$t = \text{tr} [A - B - C + D] \quad \text{de} \quad 2.13 \quad \text{tem-se}$$

$$t = \text{tr} (A-B) + \text{tr} (-C+D) = \text{tr}A - \text{tr}B - \text{tr}C + \text{tr}D$$

$$t = Kn [1+(n-1) \rho^2] - 2\rho \{(1-\rho)^2 + n [(n-2) \rho^2 + 2\rho]\} + p \cdot [1+(n-1)\rho]^2,$$

e levando o valor de t para (2.12) tem-se,

$$V(\sigma^2) = \frac{2 \{kn[1+(n-1)\rho^2] - 2p \cdot [(1-\rho)^2 + n[(n-2)\rho^2 + 2\rho]] + p[1+(n-1)\rho]^2\}}{\{kn - [1 + (n - 1)\rho]p\}^2} \sigma^4$$

$$V(\sigma^2) = \frac{2\{kn[1+(n-1)\rho^2] - p[1-2\rho+\rho^2+n^2\rho^2-2n\rho^2+2n\rho]\}}{\{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^2} \sigma^4$$

logo,

$$V(\hat{\sigma}^2) = \frac{2\{kn[1+(n-1)\rho^2] - p \cdot [(1-\rho)^2 + n\rho(\rho(n-2)+2)]\}}{\{kn - [1 + (n-1)\rho]p\}^2} \sigma^4$$

portanto, a prova do resultado está completa.

c.q.d.

Desta forma, um fator de correção para os resíduos, bem como um estimador não viciado para σ^2 são disponíveis. Contudo, observa-se que $\hat{\sigma}^2 = f(\rho)$ e assim quando a correlação ρ é desconhecida, como geralmente é o caso, não se consegue estimativas independentes de σ^2 e ρ no contexto de um único ajuste para as n replicações dos k pontos experimentais.

II.5 RESÍDUOS ORIUNDOS DE n AJUSTES, POR MQO, FEITOS COM OS k PONTOS EXPERIMENTAIS NAS n REPLICAÇÕES

II.5.1 ESTIMADORES DE σ^2 e ρ BASEADOS NOS RESÍDUOS DE AJUSTES SEPARADOS.

Fazendo-se n ajustes por MQO do modelo $\underline{y}_i = \underline{x}_i \underline{b} + \underline{e}_i$, (\underline{y} é o vetor de respostas de dimensão k , \underline{x} é a matriz do modelo de ordem $(k \times p)$, \underline{b} é o vetor de parâmetros de dimensão p e \underline{e} é o vetor de erros), separadamente nas n replicações com os k pontos experimentais, é possível obter-se estimativa não viciada de σ^2 usando os n vetores de resíduos $\hat{\underline{e}}_i$, $i = 1, 2, \dots, n$ desses ajustes. E ainda, esta estimativa é independente de ρ .

Usando-se y_1, y_2, \dots, y_n para denotar, respectivamente, os vetores de respostas na 1ª, 2ª, ..., nª replicação, e considerando-se que y_i $i=1, 2, \dots, n$ tem dimensão k , pois existem k pontos experimentais, tem-se que os vetores de erros destes ajustes, e_1, e_2, \dots, e_n , também de dimensão k , possuem a mesma matriz de covariância $\sigma^2 \cdot I_k$, dada a sua independência. Conseqüentemente, por(|20|, p. 55)

$$\begin{aligned}
 E\left(\sum_{i=1}^k e_{ij}^2\right) &= E(\underline{e}_j' \underline{e}_j) \\
 &= E\{\underline{Y}_j' [I_k - x(x'x)^{-1}x'] [I_k - x(x'x)^{-1}x'] \underline{Y}_j\} \\
 &= E\{\underline{Y}_j' [I_k - x(x'x)^{-1}x'] \underline{Y}_j\} \\
 &= (n - p)\sigma^2 \quad j = 1, 2, \dots, n.
 \end{aligned}$$

Assim, o estimador não viciado de $\sigma^2 = V(\epsilon_i)$ $i = 1, 2, \dots, k$, com base nos resíduos $\hat{\underline{e}}_j = [\hat{e}_{1j}, \hat{e}_{2j}, \hat{e}_{3j}, \dots, \hat{e}_{kj}]$ é

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{k-p} \sum_{i=1}^k \hat{e}_{ij}^2 = \frac{1}{k-p} \cdot \hat{\underline{e}}_j' \cdot \hat{\underline{e}}_j \quad j=1,2,\dots,n$$

(2.15)

Para tornar mais claro o entendimento destas considerações, é útil enfatizar-se que os erros independentes que compõem \underline{e}_i do ajuste do modelo na i -ésima replicação estão correlacionados com os erros \underline{e}_j do ajuste em j , $i \neq j$, com coeficiente de correlação ρ , ou melhor, embora se tenha

$$\underline{e}_i \sim (0, I_k \sigma^2), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

em $i \neq j$ ocorre que a m -ésima componente de \underline{e}_i está correlacionada com a ℓ -ésima componente de \underline{e}_j ou seja

$$\text{corr}(e_{mi}, e_{\ell j}) = \rho$$

$$m, \ell = 1, 2, \dots, k$$

donde então

$$\text{cov}(e_{mi}, e_{\ell j}) = \sigma^2 \rho \quad (2.16)$$

Desta forma, a matriz de covariância entre os vetores do par $(\underline{e}_i, \underline{e}_j)$ é

$$\text{cov}(\underline{e}_i, \underline{e}_j) = \rho \sigma^2 \cdot I_k \quad i \neq j. \quad (2.17)$$

A seguir é apresentado um resultado que fornece estimativas independentes de σ^2 e ρ , com base em ajustes nas replicações, separadamente.

RESULTADO 5: Seja o modelo $\underline{Y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}$ com $V(\underline{\varepsilon}) = \underline{K} \underline{\Sigma} \underline{K} =$
 $= \sigma^2 \cdot I_k \otimes \underline{E}_n$ e $\underline{E}_n = (e_{ij})$ tal que
 $e_{ij} = 1$ se $i=j$ e $e_{ij} = \rho$ se $i \neq j$, onde n
 corresponde ao número de replicações de um ponto experimental i , $i=1,2,\dots,k$ (conforme melhor descrito em 2.1 e 2.2). Sejam $\hat{\underline{e}}_1, \hat{\underline{e}}_2, \dots, \hat{\underline{e}}_n$ vetores de dimensão k , dos resíduos indepen

dentes gerados em ajustes por MQO do modelo $\underline{y} = \underline{x}\underline{b} + \underline{e}$ (\underline{y} , \underline{e} são vetores de dimensão k , \underline{b} é vetor de dimensão p , \underline{x} é matriz de ordem $(k \times p)$ e o posto de $\underline{x}'\underline{x}$ é igual a p) usando-se separadamente as respostas y_1, y_2, \dots, y_n na 1ª, 2ª, ..., nª replicação dos k pontos experimentais. Então o estimador não viciado da $V(\epsilon_i) = \sigma^2$, $i = 1, 2, \dots, k$, independente de ρ , é dado por:

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{n(k-p)} \sum_{j=1}^n \hat{\underline{e}}_j' \cdot \hat{\underline{e}}_j, \quad (2.18)$$

e o estimador de ρ , função de estimativas de máxima verossimilhança desse parâmetro, independente de σ^2 e considerando-se ϵ_i , normal é

$$\hat{\rho} = \frac{Q \sum_{\ell=1}^Q \sum_{m=i}^k \hat{\epsilon}_{m\ell i} \hat{\epsilon}_{m\ell j}}{Q \sqrt{\sum_{m=i}^k \hat{\epsilon}_{m\ell i}^2 \sum_{m=i}^k \hat{\epsilon}_{m\ell j}^2}} \quad (2.19)$$

onde Q corresponde ao número de pares de ajustes distintos que se pode obter com os n ajustes separados nas replicações.

PROVA

Quando se dispõe de n estimativas não viciadas de um parâmetro σ^2 (conforme 2.15), a média destas n estimativas é também estimativa não viciada do parâmetro, portanto

$$E(\hat{s}^2) = \frac{1}{n \cdot (k-p)} \cdot E \left(\sum_{j=1}^n \hat{\underline{e}}_j' \hat{\underline{e}}_j \right)$$

$$E(\dot{s}^2) = \frac{1}{n \cdot (k - p)} \cdot \sum_{j=1}^n E(\hat{e}_i' \hat{e}_j),$$

como por hipótese do ajuste do modelo $V(\underline{e}) = \sigma^2 \cdot I_k$ e o posto de $\underline{x}' \times \underline{e}$ é p , tem-se por ([20] p. 55)

$$E(\dot{s}^2) = \frac{1}{n \cdot (k - p)} \cdot \sum_{j=1}^n (k-p) \sigma^2$$

$$E(\dot{s}^2) = \frac{n \cdot (k - p) \sigma^2}{n \cdot (k - p)} = \sigma^2, \quad ,$$

e desta forma \dot{s}^2 é não viciado para σ^2 , logo a 1ª parte do resultado está provada.

Admitindo-se agora, que os pares $(\hat{e}_{mi}, \hat{e}_{mj})$ $m=1,2,3, \dots, k$, formados com os resíduos correspondentes dos vetores \hat{e}_i e \hat{e}_j , constituem uma a.a. de uma população normal bivariada ' do tipo

$$N_2(\underline{0}, \sigma^2 \cdot {}_2E_2) \quad ,$$

fazendo-se $\underline{x}' = [\hat{e}_{mi} \quad \hat{e}_{mj}]$ $m=1,2,\dots,k$, em

$$p(\underline{x}) = \frac{1}{2\pi \sqrt{|\sigma^2 E|}} \cdot \exp. \left\{ -\frac{1}{2} [\underline{x}' (\sigma^2 E)^{-1} \underline{x}] \right\}$$

$$\underline{x} \in R^2$$

conseqüentemente para uma amostra de k vetores tem-se

$$p(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_k) = \frac{1}{(2\pi\sqrt{|\sigma^2 E|})^k} \cdot \exp.\left\{-\frac{1}{2} \sigma^{-2} \sum_{m=1}^k (\underline{x}_m' E^{-1} \underline{x}_m)\right\}$$

$$p(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_k) = \left\{ \exp. [-k \cdot \ln(2\pi\sqrt{|\sigma^2 E|})] - \frac{\sigma^{-2}}{2(1-\rho^2)} \cdot \sum_{m=1}^k (\underline{x}_m' \begin{bmatrix} 1 & -\rho \\ -\rho & 1 \end{bmatrix} \underline{x}_m) \right\} ;$$

resulta com $\underline{x}' = [\hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}]$

$$p(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_k) = \left\{ \exp. [-k \cdot \ln(2\pi\sqrt{|\sigma^2 E|})] - \frac{1}{2(1-\rho^2)\sigma^2} \cdot \sum_{m=1}^k ([\hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}] \begin{bmatrix} 1 & -\rho \\ -\rho & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{e}_{mi} \\ \hat{e}_{mj} \end{bmatrix}) \right\}$$

$$p(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_k) = \left\{ \exp. [-k \cdot \ln(2\pi\sqrt{|\sigma^2 E|})] - \frac{1}{2(1-\rho^2)\sigma^2} \cdot \sum_{m=1}^k \left(\begin{bmatrix} \hat{e}_{mi} & -\rho \hat{e}_{mi} \\ -\hat{e}_{mj} \rho & \hat{e}_{mj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{e}_{mi} \\ \hat{e}_{mj} \end{bmatrix} \right) \right\}$$

$$p(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_k) = \left\{ \exp. [-k \cdot \ln(2\pi\sqrt{|\sigma^2 E|})] - \frac{1}{2(1-\rho^2)\sigma^2} \cdot \sum_{m=1}^k (\hat{e}_{mi}^2 - 2\rho \hat{e}_{mi} \cdot \hat{e}_{mj} + \hat{e}_{mj}^2) \right\}$$

$$\hat{p}(x_1, x_2, \dots, x_k) = \{\exp. [-k \cdot \ln(2\pi\sqrt{\sigma^2 E})]\} - \frac{1}{2(1-\rho^2)} \cdot$$

$$\cdot \left[\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi}^2 - 2\rho \sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj} + \sum_{m=1}^k \hat{e}_{mj}^2 \right] \}$$

donde se pode observar que

$$\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}$$

é uma estatística suficiente para ρ , e ainda uma vez que a função

$$c(\rho) = \frac{\rho}{(1 - \rho^2) \cdot \sigma^2}$$

tem o campo de variação com interior não vazio pode-se determinar o estimador de máxima verossimilhança de ρ através de equação (|21| p.106)

$$E\left(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}\right) = \sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj} \quad , \quad (2.20)$$

a esperança do produto cruzado do 1º membro é

$$\begin{aligned} E\left(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}\right) &= E(\hat{e}_i' \hat{e}_j) = E\{[(I_k - x(x'x)^{-1}x')\underline{y}_i]'[(I_k - x(x'x)^{-1}x')\underline{y}_j]\} \\ &= E[\underline{y}_i' \underline{y}_j] - E[\underline{y}_i' \cdot x(x'x)^{-1}x' \underline{y}_j] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E[(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_1)'(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_j)] - E[(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_j)' \underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}'(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_j)] \\
&= E[\underline{b}'\underline{x}'\underline{x}\underline{b} + \underline{b}'\underline{x}\underline{e}_j + \underline{e}_1'\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_1'\underline{e}_j] - E[\underline{b}'\underline{x}'(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_j)' + \\
&\quad + \underline{e}_1'\underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}'(\underline{x}\underline{b} + \underline{e}_j)] \\
&= \underline{b}'\underline{x}'\underline{x}\underline{b} + 0 + 0 + E(\underline{e}_1'\underline{e}_j) - \underline{b}'\underline{x}'\underline{x}\underline{b} - 0 - 0 - E[\underline{e}_1'\underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}'\underline{e}_j]
\end{aligned}$$

e deste modo segue que:

$$\begin{aligned}
E(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}) &= E(\sum_{m=1}^k e_{mi} e_{mj}) - E[\underline{e}_i \underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}' \underline{e}_j] \\
&= \sum_{m=1}^k E(e_{mi} e_{mj}) - E[\underline{e}_i \underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}' \underline{e}_j] \quad ,
\end{aligned}$$

a expressão entre colchetes é uma forma bilinear portanto por ([20] p. 64-65) e usando (2.17) resulta:

$$\begin{aligned}
E(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}) &= \sum_{m=1}^k \text{cov}(e_{mi} e_{mj}) - \text{tr}[\underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}' \cdot (\rho\sigma^2 I_k)] - \\
&\quad - 0 [\underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}'] 0 \quad ,
\end{aligned}$$

substituindo-se $\text{cov}(e_{mi}, e_{mj})$ por 2.1.6 dá

$$E(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}) = k \cdot \rho\sigma^2 - \rho\sigma^2 \text{tr} [\underline{x}(\underline{x}'\underline{x})^{-1} \underline{x}'] = 0$$

$$= k \rho \sigma^2 - p \cdot \rho \sigma^2$$

$$= (k - p) \rho \sigma^2$$

logo a equação em (2.20) adquire a forma:

$$E\left(\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}\right) = (k - p) \rho \sigma^2 = \sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj} ,$$

donde

$$\hat{\rho} = \frac{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}}{(k-p) \sigma^2}$$

e ainda pelas mesmas razões da família exponencial ([21] p.106) com

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi}^2}{k - p} \quad e \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mj}^2}{k - p}$$

tem-se

$$\hat{\rho} = \frac{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi} \hat{e}_{mj}}{\sqrt{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{mi}^2 \sum_{m=1}^k \hat{e}_{mj}^2}} \quad (2.21)$$

e considerando-se que existem $\binom{n}{2}$ pares distintos (i, j) de ajustes na situação de ajustes separados nas n replicações, portanto

$$Q = \frac{n(n - 1)}{2}$$

estimativas de $\hat{\rho}$, pois $i, j = 1, 2, 3, \dots, n$, conclui-se que

$$\hat{\rho} = \frac{\sum_{\ell=1}^Q \sum_{m=1}^k \hat{e}_{m\ell i} \cdot \hat{e}_{m\ell j}}{Q \sqrt{\sum_{m=1}^k \hat{e}_{m\ell i}^2 \sum_{m=1}^k \hat{e}_{m\ell j}^2}}$$

e a prova do resultado está completa.

c.q.d.

II.5.2 UM ESTIMADOR PARA ρ BASEADO NOS COEFICIENTES DE REGRESSÃO, OBTIDOS EM AJUSTES DOS Q PARES DISTINTOS DE RESÍDUOS (\hat{e}_i, \hat{e}_j) ORIUNDOS DOS AJUSTES SEPARADOS.

É possível admitir que a forma de auto-regressão entre os resíduos do par (\hat{e}_i, \hat{e}_j) $i \neq j$ seja do tipo:

$$\hat{e}_{jg} = \rho \hat{e}_{ig} + u_g \quad g = 1, 2, \dots, k,$$

onde u_g é a perturbação pura. Deste modo um estimador para ρ é expresso pelo coeficiente de regressão,

$$(\hat{e}_i' \hat{e}_i)^{-1} \hat{e}_i' \hat{e}_j$$

e considerando-se os $Q = \frac{n(n-1)}{2}$ pares de vetores de resíduos dos ajustes distintos com as n replicações tem-se o resultado seguinte:

RESULTADO 6: Sejam $\hat{\underline{e}}_1, \hat{\underline{e}}_2, \dots, \hat{\underline{e}}_n$ vetores de dimensão k , dos resíduos independentes gerados por ajustes, separados nas n replicações MQO do modelo $\underline{y} = \underline{x}\underline{b} + \underline{e}$, com \underline{x} de ordem $(k \times p)$ e \underline{b} de dimensão p . Então, um estimador do coeficiente de correlação ρ , entre as replicações, baseado nos coeficientes de regressão do ajuste do modelo $\hat{\underline{e}}_j = \hat{\underline{e}}_i \cdot \rho + \underline{u}$ considerando os $Q = n \cdot (n - 1)/2$ pares distintos de vetores $(\underline{e}_i, \underline{e}_j)$ $i \neq j$ é dado por

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{Q} \cdot \sum_{\ell=1}^Q \frac{\hat{\underline{e}}_{i\ell}' \hat{\underline{e}}_{j\ell}}{\hat{\underline{e}}_{i\ell}' \hat{\underline{e}}_{i\ell}} \quad (2.22)$$

PROVA

Considerando o par de vetores $(\hat{\underline{e}}_i, \hat{\underline{e}}_j)$ tem-se por MQO a estimativa $(\hat{\underline{e}}_i' \hat{\underline{e}}_i)^{-1} \hat{\underline{e}}_i' \hat{\underline{e}}_j$ de ρ , assim para $\ell = 1, 2, \dots, Q$ pares distintos a estimativa média é igual a

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{Q} \sum_{\ell=1}^Q \frac{\hat{\underline{e}}_{i\ell}' \hat{\underline{e}}_{j\ell}}{\hat{\underline{e}}_{i\ell}' \hat{\underline{e}}_{i\ell}}$$

c.q.d.

II.6 OS ESTIMADORES DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA DE $\hat{\underline{\beta}}_{mqg}$

A estatística $\hat{\underline{\beta}}_{mqg}$ possui matriz de covariância dada pelo RESULTADO 2, na expressão (2.8)

$$V(\hat{\beta}_{mqg}) = \sigma^2 [1 + (n-1)\rho] (X'X)^{-1}$$

que como se vê é função de σ^2 e ρ , em geral desconhecidos. Desta forma estimativas independentes de σ^2 e ρ são necessárias para se ter um estimador conveniente desta matriz. Com base nos estimadores obtidos nos resultados anteriores é possível estimar $V(\hat{\beta}_{mqg})$ dos seguintes modos:

(i) usando s^2 e $\tilde{\rho}$:

$$s^2 [1 + (n-1)\tilde{\rho}] (X'X)^{-1} \quad (2.23)$$

(ii) usando $\hat{\sigma}^2$ e $\dot{\rho}$:

$$\hat{\sigma}^2 [1 + (n-1)\dot{\rho}] (X'X)^{-1} \quad (2.24)$$

(iii) usando $\hat{\sigma}^2$ e $\tilde{\rho}$:

$$\hat{\sigma}^2 [1 + (n-1)\tilde{\rho}] (X'X)^{-1} \quad (2.25)$$

(iv) usando \dot{s}^2 e $\dot{\rho}$:

$$\dot{s}^2 [1 + (n-1)\dot{\rho}] (X'X)^{-1} \quad (2.26)$$

Uma vez que se obteve vários estimadores para $V(\hat{\beta}_{mqg})$, uma simulação se faz necessária para determinar quem possui o melhor desempenho e, evidentemente, comparar com o método não paramétrico "bootstrap". No capítulo seguinte, este procedimento é analisado.

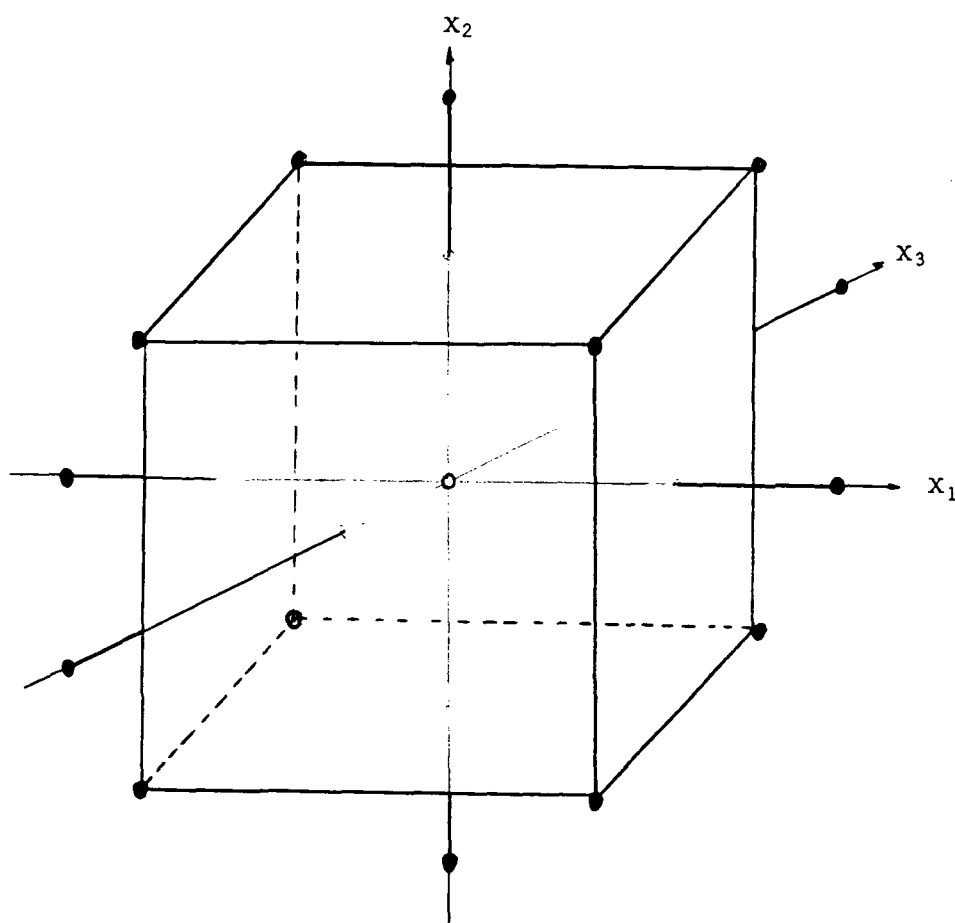
III. SIMULAÇÃO E CONCLUSÃO

III.1 AJUSTE DE UMA SUPERFÍCIE DE RESPOSTA: O DELINEAMENTO DE BOX (CUBO + ESTRELA)

Para examinar-se o desempenho do "Bootstrap" comparativamente ao do MQG-1, escolheu-se o ajuste de uma superfície de resposta no delineamento composto cubo + estrela + pontos centrais, para três fatores. É comum o ajuste de superfície de resposta de 2ª ordem neste delineamento e muitas vezes o experimentador usa observações experimentais replicadas. Pode ocorrer do experimentador por desconhecimento ou impossibilidade técnica obter as replicações de modo a gerar correlação entre elas. Aí, o "bootstrap" pode entrar como método alternativo ou simplesmente como um indicador da performance do método adotado, uma vez que ele é uma técnica independente de qualquer suposição probabilística ortodoxa.

Como se sabe, diversos delineamentos foram criados para ajustamento de superfícies de respostas. Se o modelo é de 1ª ordem os delineamentos fatoriais a dois níveis, do tipo 2^f são comumente usados devido sua simplicidade e parcimônia. Quando o ajustamento é o de modelos de 2ª ordem, um número maior de níveis diferentes para cada fator é necessário. Os delineamentos compostos constituídos por um cubo 2^f mais uma "estrela" de $2f$ pontos axiais e g pontos centrais apresentam diversas propriedades que os tornam recomendáveis, dentre as

quais destacam-se a ortogonalidade e rotacionalidade, além de economia no número de pontos experimentais. Assim, dependendo do número de pontos centrais acrescentados, esse delineamento pode ser ortogonal além de rotacional ou ainda ter precisão uniforme (vide [14] p.213-215) ou melhor, a variância do valor ajustado na origem é igual a variância deste valor a distância $d=1$, logo se consegue valores satisfatórios para os vícios nos coeficientes de regressão devido a possíveis termos de ordem mais alta na verdadeira superfície de resposta. Quando $f=3$, que foi o caso adotado neste trabalho, o delineamento composto de 2ª ordem é apresentado na figura seguinte, que é clássica na literatura de planejamento de experimentos (ver [15] p.344-346).



Fez-se então a simulação, neste contexto, com a matriz de planejamento de um delineamento rotacional composto central "cubo + estrela + pontos centrais". Primeiro um rotacional composto central equiradial sem fixação particular de um número de pontos centrais g que resultasse em precisão uniforme. O quadro 3.1, a seguir, mostra a matriz de planejamento do delineamento com $f=3$ fatores que corresponde a $2^3 = 8$ pontos na porção fatorial, $2f=6$ pontos axiais e $g=4$ pontos centrais.

QUADRO 3.1 - MATRIZ DE PLANEJAMENTO DE UM DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL "CUBO + ESTRELA+ 4 PONTOS CENTRAIS".

1.	-1.000	-1.000	-1.000	1.	1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	-1.000	1.000	1.	-1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	1.000	-1.000	-1.	1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	1.000	1.000	-1.	-1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	-1.000	-1.000	-1.	-1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	-1.000	1.000	-1.	1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	1.000	-1.000	1.	-1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	1.000	1.000	1.	1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.732	0.000	0.000	0.	0.	0.	2.999	0.000	0.000
1.	1.732	0.000	0.000	0.	0.	0.	2.999	0.000	0.000
1.	0.000	-1.732	0.000	0.	0.	0.	0.000	2.999	0.000
1.	0.000	1.732	0.000	0.	0.	0.	0.000	2.999	0.000
1.	0.000	0.000	-1.732	0.	0.	0.	0.000	0.000	2.999
1.	0.000	0.000	1.732	0.	0.	0.	0.000	0.000	2.999
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000

Depois, fixando $g = 6$ e a coordenada $\alpha = \sqrt[4]{8} \approx 1,682$, tem-se a matriz do delineamento rotacional composto central com precisão uniforme. A este planejamento corresponde a matriz do quadro 3.2 a seguir.

QUADRO 3.2 - MATRIZ DE PLANEJAMENTO DE UM DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL "CUBO + ESTRELA + 6 PONTOS CENTRAIS" (PRECISÃO UNIFORME)

1.	-1.000	-1.000	-1.000	1.	1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	-1.000	1.000	1.	-1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	1.000	-1.000	-1.	1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.000	1.000	1.000	-1.	-1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	-1.000	-1.000	-1.	-1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	-1.000	1.000	-1.	1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	1.000	-1.000	1.	-1.	-1.	1.000	1.000	1.000
1.	1.000	1.000	1.000	1.	1.	1.	1.000	1.000	1.000
1.	-1.682	0.000	0.000	0.	0.	0.	2.829	0.000	0.000
1.	1.682	0.000	0.000	0.	0.	0.	2.829	0.000	0.000
1.	0.000	-1.682	0.000	0.	0.	0.	0.000	2.829	0.000
1.	0.000	1.682	0.000	0.	0.	0.	0.000	2.829	0.000
1.	0.000	0.000	-1.682	0.	0.	0.	0.000	0.000	2.829
1.	0.000	0.000	1.682	0.	0.	0.	0.000	0.000	2.829
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000
1.	0.000	0.000	0.000	0.	0.	0.	0.000	0.000	0.000

Simulou-se, então, o ajuste da superfície de respos -

-tas de 2ª ordem,

$$Y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_7 x_1^2 + \beta_8 x_2^2 + \beta_9 x_3^2 + \epsilon_{ij} \quad (3.1)$$

adotando-se a matriz do modelo, conforme a situação dos quadros 3.1 e 3.2 com o número de replicações dos pontos experimentais fixado em $n=2$ e também em $n=5$. Considerou-se (3.1) enquadrada no modelo (2.1), estabeleceu-se a correlação entre as replicações em $\rho = 0,9$ e os parâmetros β_i , $i=0,1,2,\dots,9$, foram fixados em zero para maior simplificação, sem perda de generalidade.

III.2 RESÍDUOS: DISTRIBUIÇÃO DE PROBABILIDADE E GERAÇÃO

Estudou-se primeiramente, o desempenho dos procedimentos quando os resíduos têm distribuição $N(0,1)$, depois quando eles são provenientes de uma mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$ em igual proporção. Para se obter resíduos de $N(0,1)$ correlacionados na forma como foi definida no capítulo II, não é muito simples, um detalhamento teórico é necessário. Seja o vetor

$$\underline{X} \sim N_{kn}(\underline{0}, \sigma^2 \cdot I_{kn}) ,$$

logo com componentes X_i independentes e deseja-se determinar o vetor

$$\underline{Y} \sim N_{kn}(\underline{0}, \Sigma)$$

com Σ definido em (2.2). É claro que a obtenção de \underline{Y} é conseguida mediante uma transformação adequada

$$\underline{Y} = \underline{A}\underline{X} \quad (3.2)$$

Para determinar a matriz de transformação \underline{A} é preciso conhecer que pelo Teorema da Decomposição Espectral tem-se

$$\Sigma = \underline{P} \underline{\Lambda} \underline{P}'$$

onde \underline{P} é a matriz ($kn \times kn$), dos auto-vetores e $\underline{\Lambda}$ é a matriz diagonal dos auto-valores. Desta forma resulta que

$$\Sigma^{1/2} = \underline{P} \underline{\Lambda}^{1/2} \underline{P}'$$

Portanto, calculando-se a variância do vetor \underline{Y} ,

$$V(\underline{Y}) = V(\underline{A}\underline{X}) = \underline{A}V(\underline{X})\underline{A}' = \underline{A}\sigma^2 \cdot I_{kn}\underline{A}' = \sigma^2 \underline{A}\underline{A}'$$

e tomando-se $\underline{A} = \underline{P} \underline{\Lambda}^{1/2}$ obtem-se

$$V(\underline{Y}) = \sigma^2 \cdot \underline{P} \underline{\Lambda}^{1/2} \underline{P}' \cdot \underline{P} \underline{\Lambda}^{1/2} \underline{P}'$$

$$V(\underline{Y}) = \sigma^2 \underline{P} \underline{\Lambda} \underline{P}'$$

$$V(\underline{Y}) = \sigma^2 \cdot \Sigma$$

que para $\sigma^2 = 1$ está conforme o proposto. Logo, a matriz de transformação adequada é

$$A = P \Lambda^{1/2} P' .$$

Gerou-se os resíduos independentes $N(0,1)$ de acordo com o método de Box e Muller ou seja se $u_1 \sim U(0,1)$ e $u_2 \sim U(0,1)$ então

$$Z_1 = [-2,0 \cdot \ln(u_1)]^{1/2} \cdot \cos(2,0 \cdot \pi \cdot u_2)$$

$$Z_2 = [-2,0 \cdot \ln(u_1)]^{1/2} \cdot \sin(2,0 \cdot \pi \cdot u_2)$$

são independentes com distribuição comum $N(0,1)$. A partir desses resíduos, fazendo-se a transformação (3.2) chega-se aos resíduos, correlacionados, com matriz de covariância Σ . Os números aleatórios $u \sim U(0,1)$ foram gerados pela função RAN do Digital Equipment Corporation (DEC-10), sempre partindo da semente 12345.

III.3 OS CASOS ABORDADOS NA SIMULAÇÃO COMPARATIVA ENTRE * MQG-1 E "BOOTSTRAP".

III.3.1 DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL: "CUBO + ESTRELA + 6 PONTOS CENTRAIS".

Esta é a situação onde se tem precisão uniforme além de rotacionalidade. Simulou-se os seguintes casos:

$$1^\circ - \text{VARIÂNCIA DE } \hat{\beta}_{mqg} \text{ ESTIMADA POR } s^2[1+(n-1)\tilde{\rho}](X'X)^{-1} .$$

(i) Resíduos de $N(0,1)$.

Quando os resíduos não são corrigidos o desempenho do MQG-1 não é satisfatório. O método é muito otimista, como é possível ver no quadro 3.3. O "bootstrap" melhora os resultados, embora também não satisfaça plenamente.

Mas se os resíduos são corrigidos pelo fator ϕ , resultado 2.9, ocorre uma significativa melhora na performance ' do método, embora ainda continue um pouco otimista. Por outro lado o "bootstrap" mostra um resultado que pode ser considerado bom, como se pode observar no quadro 3.3

(ii) Resíduos de mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$.

O desempenho dos métodos é semelhante ao ocorrido em (i) como se nota no quadro 3.4. Isto não é surpresa quanto ao "bootstrap", que é um método não-paramétrico. Quanto a performance do MQG-1 nos resíduos da mistura, é justificável talvez pela simetria da distribuição resultante na mistura.

QUADRO 3.3

NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90%
DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 RE-
PETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP" ,
RESÍDUOS $N(0,1)$.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\tilde{\rho})$			
	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS
β_0	403	421	396	432	439	447	440	456
β_1	396	426	401	436	428	445	438	456
β_2	399	430	393	426	438	445	445	459
β_3	423	437	371	425	450	457	425	453
β_4	409	438	392	433	443	454	442	462
β_5	406	432	366	426	446	454	428	452
β_6	393	414	400	448	425	443	442	467
β_7	410	445	408	446	434	464	441	462
β_8	401	413	386	428	429	429	428	454
β_9	407	438	384	431	442	452	442	455
NUMERO ' DE REPLI- CAÇÕES	n=2		n=5		n=2		n=5	

QUADRO 3.4

NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$ EM IGUAL PROPORÇÃO.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\bar{\rho})$			
	MQG-1 com s^2 e $\bar{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\bar{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\bar{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\bar{\rho}$	BTS
β_0	415	420	402	427	447	438	431	454
β_1	401	421	386	428	432	443	437	451
β_2	411	419	403	438	439	440	445	463
β_3	411	432	416	436	434	450	448	458
β_4	408	426	402	444	440	446	442	462
β_5	423	440	403	428	445	456	446	458
β_6	425	434	400	427	445	447	448	448
β_7	413	441	407	435	441	452	447	457
β_8	415	435	397	423	445	447	440	455
β_9	408	424	409	434	438	442	455	460
NÚMERO DE REPLI- CAÇÕES	n=2		n=5		n=2		n=5	

2º - VARIÂNCIA DE $\hat{\beta}_{mqg}$ ESTIMADA POR $\hat{\sigma}^2 [1 + (n-1)\bar{\rho}] \cdot (X'X)^{-1}$.

(i) Resíduos de $N(0,1)$

Esta é uma situação onde a entrada do estimador $\hat{\sigma}^2$ substitue plenamente a falta de correção dos resíduos pelo fator ϕ , como era de se esperar. Os números dos quadros 3.3 e 3.5 mostram a equivalência entre o método em resíduos corrigidos e s^2 estimando σ^2 e o método com resíduos sem correção mas com σ^2 estimada por $\hat{\sigma}^2$. O "bootstrap" se apresenta de modo muito bom quando $n=2$, mas de forma até certo ponto conservativa se $n=5$.

QUADRO 3.5 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS $N(0,1)$

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\bar{\rho})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\bar{\rho}$	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\bar{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	439	421	440	432	447	456
β_1	428	426	438	436	445	456
β_2	438	430	445	426	445	459
β_3	450	437	425	425	457	453
β_4	443	438	442	433	454	462
β_5	446	432	428	426	454	452
β_6	425	414	442	448	443	467
β_7	434	445	441	446	464	462
β_8	429	413	428	428	429	454
β_9	442	438	442	431	452	455
NÚMERO DE RE-PLICA-ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

(ii) Resíduos de mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$

Da mesma forma que no 1º caso, também não ocorreu novidades aqui. Os números resultantes da simulação são mostrados no quadro 3.6. O "bootstrap" só se mostra razoavelmente melhor que o MQG-1 se ocorrer correção nos resíduos.

QUADRO 3.6 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$ EM IGUAL PROPORÇÃO

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\bar{p})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \bar{p}	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \bar{p}	BTS	BTS	BTS
β_0	447	420	431	427	438	454
β_1	432	421	437	428	443	451
β_2	439	419	445	438	440	463
β_3	434	432	448	436	450	458
β_4	440	426	442	444	446	462
β_5	445	440	446	428	456	458
β_6	445	434	448	427	447	448
β_7	441	441	447	435	452	457
β_8	445	435	440	423	447	455
β_9	438	424	455	434	442	460
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

3º - VARIÂNCIA DE $\underline{\beta}_{mqg}$ ESTIMADA POR $\hat{\sigma}^2 [1 + (n-1)\hat{\rho}] (X'X)^{-1}$.

(i) Resíduos de $N(0,1)$

O MQG-1 mostrou resultados semelhantes aos do 2º caso. O "bootstrap", quando os resíduos são corrigidos por $\phi = f(\hat{\rho})$, mostrou-se superior. No quadro 3.7 estão os números que indicam esta conclusão.

QUADRO 3.7 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS $N(0,1)$.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{\rho})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	438	421	435	432	444	453
β_1	428	426	431	436	443	454
β_2	433	430	445	426	447	457
β_3	450	437	425	425	455	452
β_4	442	438	438	433	454	462
β_5	448	432	429	426	451	451
β_6	430	414	440	448	445	466
β_7	436	445	438	446	465	462
β_8	429	413	427	428	431	453
β_9	437	438	434	431	452	456
NÚMERO DE RE-PLICAÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

(ii) Resíduos de mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$

O quadro 3.8 mostra um bom desempenho do MQG-1 quando a variância é estimada por $\hat{\sigma}^2$ e o coeficiente de correlação por $\hat{\rho}$. A superioridade para o "bootstrap" só ocorre se os resíduos forem corrigidos, aí então o "bootstrap" fornece um resultado satisfatório.

QUADRO 3.8 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP" RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$ EM IGUAL PROPORÇÃO.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{\rho})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	443	420	431	427	439	452
β_1	427	421	431	428	440	452
β_2	440	419	444	438	438	458
β_3	436	432	449	436	452	457
β_4	443	426	442	444	446	461
β_5	440	440	439	428	457	457
β_6	447	434	445	427	447	446
β_7	443	441	441	435	453	454
β_8	441	435	436	423	446	452
β_9	436	424	452	434	436	458
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

4º - VARIÂNCIA DE $\hat{\beta}_{mqg}$ ESTIMATIVA POR $\hat{s}^2 [1 + (n-1)\hat{\rho}] (X'X)^{-1}$

(i) Resíduos de $N(0,1)$.

Com os estimadores \hat{s}^2 e $\hat{\rho}$ o desempenho do MQG-1 é semelhante ao obtido em $\hat{\sigma}^2$ e $\tilde{\rho}$. O "bootstrap" apresentou - se de modo satisfatório, um pouco melhor que o MQG-1, desde ' que os resíduos sejam corrigidos. Os números estão no quadro 3.9

QUADRO 3.9 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETI - ÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE $N(0,1)$.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{\rho})$	
	MQG-1 com \hat{s}^2 e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com \tilde{s}^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	436	421	436	432	444	453
β_1	429	426	433	436	443	454
β_2	432	430	445	426	447	457
β_3	452	437	419	425	455	452
β_4	442	438	439	433	454	462
β_5	447	432	429	426	451	451
β_6	429	414	441	448	445	466
β_7	438	445	438	446	465	462
β_8	430	413	427	428	431	453
β_9	437	438	435	431	452	456
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

(ii) Resíduos da mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$.

A presença de resíduos $N(0,4)$ não afetou a performance dos métodos. Contudo, o "bootstrap" é bom com correção dos resíduos. Resultados numéricos no quadro 3.10.

QUADRO 3.10 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ com $N(0,4)$.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{\rho})$			
	MQG-1 com s^2 e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\hat{\rho}$	BTS	BTS	BTS	BTS	BTS
β_0	443	420	431	427	439		452	
β_1	426	421	427	428	440		452	
β_2	440	419	445	438	438		458	
β_3	437	432	449	436	452		457	
β_4	438	426	436	444	446		461	
β_5	441	440	440	428	457		457	
β_6	446	434	439	427	447		446	
β_7	441	441	438	435	453		454	
β_8	441	435	433	423	446		452	
β_9	434	424	450	434	436		458	
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2		n=5	

III.3.2 DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL: CUBO + ESTRELA + 4 PONTOS CENTRAIS.

Neste delineamento com um número de pontos centrais' $g=4$, não ocorre precisão uniforme. Simulou-se os seguintes casos relacionados abaixo em duas situações: resíduos oriundos de $N(0,1)$ e da mistura de $N(0,1)$ com $N(0,4)$ em igual proporção.

1º - Variância de $\hat{\beta}_{mqg}$ estimada por $s^2 [1+(n-1)\bar{\rho}] (X'X)^{-1}$, quadros 3.11 e 3.12.

2º - Variância de $\hat{\beta}_{mqg}$ estimada por $\hat{\sigma}^2 [1+(n-1)\bar{\rho}] (X'X)^{-1}$, quadros 3.13 e 3.14.

3º - Variância de $\hat{\beta}_{mqg}$ estimada por $\hat{\sigma}^2 [1+(n-1)\hat{\rho}] (X'X)^{-1}$, quadros 3.15 e 3.16.

4º - Variância de $\hat{\beta}_{mqg}$ estimada por $\hat{s}^2 [1+(n-1)\hat{\rho}] (X'X)^{-1}$, quadro 3.17 e 3.18.

Dos números produzidos com as simulações observou-se que no 1º caso, que é o usual, o MQG-1 é claramente inferior ao "bootstrap", principalmente quando é feita a correção dos resíduos. Nos demais casos o "bootstrap", de uma maneira geral, pode ser considerado equivalente ao MQG-1, desde que seja efetuada correção dos resíduos por ϕ . Os quadros são apresentados a seguir.

QUADRO 3.11 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE $N(0,1)$.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\tilde{\rho})$			
	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS	MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$	BTS
β_0	401	431	384	417	445	450	444	455
β_1	404	425	365	427	433	444	427	456
β_2	384	415	395	437	428	434	450	462
β_3	400	420	385	428	438	446	445	462
β_4	397	415	386	421	437	444	437	454
β_5	387	407	376	422	434	431	445	460
β_6	395	413	378	426	429	441	441	461
β_7	383	405	411	439	424	430	461	476
β_8	408	420	372	419	440	448	439	454
β_9	394	419	376	421	436	442	427	453
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2		n=5	

QUADRO 3.12 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$, EM IGUAL PROPORÇÃO.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\tilde{p})$			
	MQG-1 com s^2 e \tilde{p}	BTS	MQG-1 com s^2 e \tilde{p}	BTS	MQG-1 com s^2 e \tilde{p}	BTS	MQG-1 com s^2 e \tilde{p}	BTS
β_0	411	429	401	429	444	459	449	463
β_1	406	429	410	427	447	444	451	453
β_2	405	441	390	430	439	454	438	456
β_3	407	420	391	434	447	442	449	463
β_4	415	432	387	420	443	449	434	446
β_5	402	443	375	416	431	457	429	446
β_6	417	420	378	418	443	438	446	448
β_7	415	417	392	409	445	438	437	442
β_8	393	402	384	414	443	428	436	446
β_9	407	423	408	426	439	447	461	454
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2		n=5	

QUADRO 3.13 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE $N(0,1)$.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\tilde{p})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \tilde{p}	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \tilde{p}	BTS	BTS	BTS
β_0	445	431	444	417	450	455
β_1	433	425	427	427	444	456
β_2	428	415	450	437	434	462
β_3	438	420	445	428	446	462
β_4	437	415	437	421	444	454
β_5	434	407	445	422	431	460
β_6	429	413	441	426	441	461
β_7	424	405	461	439	430	476
β_8	440	420	439	419	448	454
β_9	436	419	427	421	442	453
NÚMERO DE RE-PLICA-ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

QUADRO 3.14 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$ EM IGUAL PROPORÇÃO.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\bar{p})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \bar{p}	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e \bar{p}	BTS	BTS	BTS
β_0	444	429	449	429	459	462
β_1	447	429	451	427	444	453
β_2	439	441	438	430	454	456
β_3	447	420	449	434	442	463
β_4	443	432	434	420	449	446
β_5	431	443	429	416	457	446
β_6	443	420	446	418	438	448
β_7	445	417	437	409	438	442
β_8	443	402	436	414	428	446
β_9	439	423	461	426	447	454
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

QUADRO 3.15 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE $N(0,1)$

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{\rho})$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	439	431	443	417	452	454
β_1	435	425	424	427	442	454
β_2	426	415	449	437	433	459
β_3	436	420	445	428	446	461
β_4	436	415	437	421	444	457
β_5	437	407	438	422	436	460
β_6	430	413	439	426	439	460
β_7	426	405	459	439	430	475
β_8	444	420	436	419	448	454
β_9	436	419	427	421	442	451
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

QUADRO 3.16 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFINAÇÃO COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$, EM IGUAL PROPOÇÃO.

PARÂ- METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\rho)$	
	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\sigma}$	BTS	MQG-1 com $\hat{\sigma}^2$ e $\hat{\sigma}$	BTS	BTS	BTS
β_0	435	429	453	429	456	463
β_1	450	429	446	427	446	453
β_2	439	441	434	430	454	456
β_3	446	420	445	434	441	463
β_4	438	432	430	420	451	446
β_5	440	443	422	416	455	446
β_6	440	420	435	418	438	448
β_7	446	417	436	409	438	442
β_8	435	402	433	414	426	446
β_9	431	423	454	426	446	454
NÚMERO DE RE- PLICA- ÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

QUADRO 3.17 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE $N(0,1)$.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\hat{p})$	
	MQG-1 com \hat{s}^2 e \hat{p}	BTS	MQG-1 com \hat{s}^2 e \hat{p}	BTS	BTS	BTS
β_0	441	431	442	417	452	454
β_1	437	425	421	427	442	454
β_2	425	415	448	437	433	459
β_3	435	420	439	428	446	461
β_4	437	415	436	421	444	457
β_5	435	407	437	422	436	460
β_6	429	413	442	426	439	460
β_7	423	405	458	439	430	475
β_8	441	420	434	419	448	454
β_9	438	419	422	421	442	451
NÚMERO DE RE-PLICAÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

QUADRO 3.18 - NÚMERO DE VEZES EM QUE O INTERVALO DE 90% DE CONFIANÇA COBRIU O PARÂMETRO EM 500 REPETIÇÕES MONTE-CARLO E 400 "BOOTSTRAP", RESÍDUOS DE MISTURA DE $N(0,1)$ COM $N(0,4)$, EM IGUAL PROPORÇÃO.

PARÂ-METRO	RESÍDUOS SEM CORREÇÃO				RESÍDUOS CORRIGIDOS POR $\phi = f(\rho)$	
	MQG-1 com \hat{s}^2 e $\hat{\rho}$	BTS	MQG-1 com \hat{s}^2 e $\hat{\rho}$	BTS	BTS	BTS
β_0	437	429	450	429	456	463
β_1	445	429	443	427	446	453
β_2	436	441	432	430	454	456
β_3	444	420	446	434	441	463
β_4	432	432	429	420	451	446
β_5	435	443	416	416	455	446
β_6	438	420	438	418	438	448
β_7	446	417	432	409	438	442
β_8	442	402	429	414	426	446
β_9	431	423	452	426	446	454
NÚMERO DE RE-PLICAÇÕES	n=2		n=5		n=2	n=5

III.4

- CONCLUSÃO FINAL

Finalizando-se este trabalho, é possível afirmar, que o "bootstrap" pode substituir adequadamente o procedimento MQG-1 quando se faz um ajuste do modelo descrito em 2.1 e 2.2. O fator de correção, aqui determinado, vem melhorar o procedimento MQG-1 usual com s^2 e $\tilde{\rho}$. O procedimento alternativo, que com $\hat{\sigma}^2$ e $\tilde{\rho}$ dispensa a correção dos resíduos, teve um desempenho bom. Quando é aplicado com \hat{s}^2 e $\hat{\rho}$, estimativas obtidas em ajustes separados, os resultados continuam praticamente os mesmos. O "bootstrap" quando confrontado com estas formas do MQG-1 só mostrou equivalência na dependência do fator de correção. Assim, o fator de correção dos resíduos determinado nesta análise mostrou-se extremamente útil, não só no que se refere ao MQG-1 com s^2 e $\tilde{\rho}$, como também ao "bootstrap".

A abordagem com a mistura de normais não resultou em maior vantagem para a técnica computacionalmente intensiva, talvez em razão da simetria da mistura em torno de zero.

A P Ê N D I C E

PROGRAMAS COMPUTACIONAIS

O programa computacional básico da simulação é o SIMU-5.FOR , cuja listagem vem a seguir. A partir desta estrutura fundamental, outras versões foram construídas tanto para um número de replicações $n=2,5$ quanto para a rotacionalidade com precisão uniforme ou não. O tempo de CPU necessário para a execução do programa em uma simulação com 500 replicações Monte-Carlo e 400 "bootstrap", no DEC-10, varia entre 20 minutos e 50 minutos conforme a versão com $n=2$ ou $n=5$. A versão básica deste programa lê a matriz do modelo X no arquivo MATM5.DAT e faz todas as operações matriciais indispensáveis usando as sub-rotinas IMSL (VTRAN, VDCPS, VMULFF, UERST, UGETIO, LINV1F, LEQT1F, LUDATN e LUELMN). Para a geração dos resíduos correlacionados, faz a leitura da matriz de transformação no arquivo MATRF5.DAT, previamente montado, e obtém o vetor dos resíduos correlacionados por operação matricial com sub-rotinas IMSL. A matriz de transformação, arquivada em MATRF5.DAT, foi construída utilizando-se o software MINITAB, sendo que especificamente usou-se o comando EIGEN para obtenção das matrizes A dos auto-valores e P dos auto-vetores.


```
C
C      *****                                     ***** C
C      *****                                     ***** C
C      *****                                     ***** C
C
C      *****                                     ***** C
C      ***** PROGRAMADO POR: ANSELMO CHAVES NETO ***** C
C      *****                                     ***** C
C
C      DIMENSION XP(90,10),X(18,10),XPT(10,90),YP(90,1),Y(18,5)
C      DIMENSION XP2(90,10),X2(18,10),XT(10,18),XTX(10,10),A(90,90)
C      DIMENSION XTXI(10,10),E(10,10),ECH0(90,1),BCH0(10,1),YCH0(90,1)
C      DIMENSION XPTXP(10,10),XPTXPI(10,10),XPTXFPT(10,90),XTXIXT(10,18)
C      DIMENSION ICONTO(10),ICONTI(10),ICONTB(10),SAMP1(10)
C      DIMENSION EZ(90,1)
C      DIMENSION BCHR(10,5),YCHR(18,5),ECHR(18,5),ECHRT(5,18),SQPC(5,5)
C      DIMENSION VBCH0(10,10),SO(10),TS0(10),EI0(10),ESO(10),AMPO(10),
*     SAMP0(10),VBCH1(10,10),SI(10),TS1(10),EI1(10),ESI(10),AMP1(10),
*     ECHC(90,1),VBCH1C(10,10),S1C(10),TS1C(10),EI1C(10),ES1C(10),
*     SAMP1C(10),ICON1C(10),ICONTI(10),ICONTS(10),EBS(90),YBS(90,1),
*     AMPOB(10),AMP1B(10),AMP1C(10),AMP1CB(10),BBS(10)
C      EQUIVALENCE (XP2(1,1),XPT(1,1))
C      EQUIVALENCE (X2(1,1),XT(1,1))
C      INTEGER P,T
C      REAL WKAREA(10)
C
C      *****                                     ***** C
C      ***** ENTRANDO COM OS PARAMETROS E ARGUMENTOS ***** C
C      *****                                     ***** C
C
C      TYPE 5
5     FORMAT(' ***** ENTRE RHO *****')
10    ACCEPT 10,RHO
10    FORMAT(G)
10    TYPE 15
15    FORMAT(' ***** ENTRE VARIANCIA SIGMA2 *****')
20    ACCEPT 20,SIGMA2
20    FORMAT(G)
20    B=RHO**2
20    TRHO=SQRT(1.0 - B)
20    SIGMA=SQRT(SIGMA2)
20    PI=3.1415926
20    K=18
20    N=5
20    F=10
20    KN=K*N
20    MKN=MKN/2
20    IDGT=0
20    IER=0
20    Q=N*(N-1)/2
20    FKN=FLOAT(KN)
20    FK=FLOAT(K)
20    FP=FLOAT(F)
20    EN=FLOAT(N)
```

```

C      *****
C      ***** LENDO A MATRIZ DO MODELO EM MATM5.DAT EXP(90,10) *****
C      *****
C
C      OPEN (UNIT=20,FILE='MATM5',ACCESS='SEQIN')
C      DO 50 I=1,KN
C      READ(20,40)(XP(I,J),J=1,P)
40    FORMAT(F3.0,3F7.3,3F4.0,3F6.3)
50    CONTINUE
C      CLOSE (UNIT=20)
C
C      *****
C      *****          CALCULO DA MATRIZ L(XP)'(XP)JINV *****
C      *****
C
C      DO 55 I=1,KN
C      DO 55 J=1,P
C      XP2(I,J)=XP(I,J)
55    CONTINUE
C      CALL VTRAN(XP2,KN,P)
C      CALL VMULFF(XPT,XP,P,KN,P,P,KN,XPTXP,P,IER)
C      CALL LINV1F(XPTXP,P,P,XPTXPI,IDGT,WKAREA,IER)
C
C      *****
C      *****          CALCULO DA MATRIZ L(XP)'(XP)JINV(XP)' *****
C      *****
C
C      CALL VMULFF(XPTXPI,XPT,P,P,KN,P,P,XPTXPT,P,IER)
C
C      *****
C      *****          LENDO A MATRIZ DO MODELO X(18,10) *****
C      *****          SEM REPLICACAO EM MATM1.DAT *****
C      *****
C
C      OPEN (UNIT=22, FILE='MATM1', ACCESS='SEQIN')
C      DO 70 I=1,K
C      READ (22,60)(X(I,J),J=1,P)
60    FORMAT(F3.0,3F7.3,3F4.0,3F6.3)
70    CONTINUE
C      CLOSE (UNIT=22)
C
C      *****
C      *****          CONCENTRANDO AS OPERACOES MATRICIAIS *****
C      *****          FORA DO ELO MONTE-CARLO *****
C      *****
C
C      DO 75 I=1,K
C      DO 75 J=1,P
C      X2(I,J)=X(I,J)
75    CONTINUE
C      CALL VTRAN(X2,K,P)
C      CALL VMULFF(XT,X,P,K,P,P,K,XTX,P,IER)
C      CALL LINV1F(XTX,P,P,XTXI,IDGT,WKAREA,IER)
C      CALL VMULFF(XTXI,XT,P,P,K,P,P,XTXIXT,P,IER)

```

```

C                                     C
C *****                           ***** C
C ***** ENTRANDO COM OS PARAMETROS PARA A ***** C
C ***** A SIMULACAO MONTE-CARLO ***** C
C ***** ***** C
C                                     C

77  TYPE 77
    FORMAT(' * ENTRE NMC (REPS M,CARLO) E NBS (REPS BOOTSTRAP) *')
    ACCEPT 78, NMC,NBS
78  FORMAT(2G)
    TYPE 80
80  FORMAT(' *** ENTRE A SEMENTE ***')
    ACCEPT 85, ISEED
85  FORMAT(I)
    CALL SETRAN(ISEED)
C                                     C
C *****                           ***** C
C ***** OS LIMITES DE 0.90 PARA OS INTERVALOS BOOTSTRAP ***** C
C ***** ***** C
C                                     C

    EIBS = 0.05*NBS + 1.0
    ESBS = 0.95*NBS
    TYPE 87, EIBS, ESBS
87  FORMAT(' OS LIMITES SAO',2F6.1)
C                                     C
C *****                           ***** C
C ***** ZERANDO OS ACUMULADORES ***** C
C ***** ***** C
C                                     C

    DO 90 I=1,10
        ICONTO(I)=0
        ICONTI(I)=0
        ICONTB(I)=0
        ICONIC(I) =0
        SAMP0(I) =0
        SAMP1(I) =0
        SAMP1C(I) =0
90  CONTINUE
    SS2PON = 0
    SRHOP0 = 0
    SSIG2F = 0
    SS2 = 0
C                                     C
C *****                           ***** C
C ***** LENDO A MATRIZ DE TRANSF. A(90,90) EM MATRF5.DAT ***** C
C ***** ***** C
C                                     C

    OPEN (UNIT=20,FILE='MATRF5',ACCESS='SEQIN')
C
    JN=1
91  DO 95 I=1,KN
        READ (20,93)(A(I,J),J=JN,JN+4)
93  FORMAT(5F)
95  CONTINUE
    IF((JN+4).GE.90) GO TO 97
    JN=JN+5
    GO TO 91
97  CLOSE (UNIT=20)

```

```

C
C *****
C ***** INICIO DO ELO MONTE-CARLO *****
C *****
C *****
C DO 500 IMC=1,NMC
C
C *****
C ***** ZERANDO OS ACUMULADORES DO CALCULO DAS ESTIMATIVAS *****
C ***** DA VARIANCIA E DO COEFICIENTE DE CORRELACAO *****
C *****
C
C S2ER1 = 0.0
C
C *****
C ***** GERANDO OS RESIDUOS N(0,1) EM EZ(90,1) *****
C *****
C *****
C DO 100 I=1,K
C U1=RAN(ISEED)
C U2=RAN(ISEED)
C EZ(5*I-4,1)=SQRT(-2.0*ALOG(U1))*COS(2.0*PI*U2)
C EZ(5*I-3,1)=SQRT(-2.0*ALOG(U1))*SIN(2.0*PI*U2)
C U3=RAN(ISEED)
C U4=RAN(ISEED)
C EZ(5*I-2,1)=SQRT(-2.0*ALOG(U3))*COS(2.0*PI*U4)
C EZ(5*I-1,1)=SQRT(-2.0*ALOG(U3))*SIN(2.0*PI*U4)
C U5=RAN(ISEED)
C U6=RAN(ISEED)
C EZ(5*I,1)=SQRT(-2.0*ALOG(U5))*COS(2.0*PI*U6)
100 CONTINUE
C
C *****
C ***** GERANDO OS RESIDUOS (RESPOSTAS) CORRELACIONADOS *****
C ***** EM YP(90,1) *****
C *****
C *****
C CALL VMULFF(A,EZ,KN,KN,1,KN,KN,YP,KN,IER)
C
C *****
C ***** SEPARANDO OS RESIDUOS (RESPOSTAS) CORRELACIONADOS *****
C ***** PELAS N REPLICACOES E COLOCANDO EM Y(18,5) *****
C *****
C *****
C DO 110 I=1,K
C Y(I,1) = YP(5*I-4,1)
C Y(I,2) = YP(5*I-3,1)
C Y(I,3) = YP(5*I-2,1)
C Y(I,4) = YP(5*I-1,1)
C Y(I,5) = YP(5*I,1)
110 CONTINUE
C
C *****
C ***** O VETOR BCH0 DAS ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS POR NQO ***
C *****
C *****
C CALL VMULFF(XPTXPT,YP,P,KN,1,P,KN,BCH0,P,IER)

```

```

C          *****
C          ***** O VETOR YCHO DAS ESTIMATIVAS DAS RESPOSTAS POR MQO *****
C          *****
C          CALL VMULFF(XP,BCHO,KN,P,1,KN,P,YCHO,KN,IER)
C
C          *****
C          *****          O VETOR ECHO DOS RESIDUOS EM MQO          *****
C          *****
C          DO 120 I=1,KN
C              ECHO(I,1)=YP(I,1) - YCHO(I,1)
120      CONTINUE
C          *****
C          ***** FAZENDO OS AJUSTES COM AS REPLICACOES SEPARADAS *****
C          ***** PARA SE OBTER ESTIMATIVA DE SIGMA2 E DE RHO *****
C          *****
C          *****
C          ***** OS N=5 VETORES DE ESTIMATIVAS DOS PARAMETROS *****
C          *****          EM BCHR(10,5) *****
C          CALL VMULFF(CTXIXT,Y,P,K,N,P,K,BCHR,P,IER)
C
C          *****
C          ***** OS N=5 VETORES DE ESTIMATIVAS DAS RESPOSTAS *****
C          *****          EM YCHR(18,5) *****
C          *****
C          CALL VMULFF(X,BCHR,K,P,N,K,P,YCHR,K,IER)
C
C          *****
C          ***** OS N=5 VETORES DOS RESIDUOS DOS AJUSTES *****
C          *****          EM ECHR(18,5) *****
C          DO 130 I=1,K
C          DO 130 J=1,N
C              ECHR(I,J) = Y(I,J) - YCHR(I,J)
130      CONTINUE
C          *****
C          ***** A ESTIMATIVA NAO VICIADA DE SIGMA2 COM BASE *****
C          ***** NOS RESIDUOS DE AJUSTES SEPARADOS (2.18) RESULT.5 *****
C          *****
C          DO 140 I=1,K
C          DO 140 J=1,N
C              ECHRT(J,I) = ECHR(I,J)
140      CONTINUE
C          CALL VMULFF(ECHRT,ECHR,N,K,N,N,K,SQPC,N,IER)
C          SSQ = 0
C          DO 145 I=1,N
C              SSQ = SSQ + SQPC(I,I)
145      CONTINUE
C          S2PON = SSQ/(FN*(FK - FP))
C          SS2PON = SS2PON + S2PON

```

```

C
C *****
C ***** A ESTIMATIVA DE RHO COM BASE NOS RESIDUOS *****
C ***** DE AJUSTES SEPARADOS (2.19) RESULTADO 5 *****
C *****
C
SSPC = 0
DO 147 I=1,N
DO 147 J=1,N
      IF(J.LE.I) GO TO 147
      R=SQRT((SQPC(I,I))*(SQPC(J,J)))
      SSPC=SSPC + (SQPC(I,J))/R
147 CONTINUE
C
RHOPON = SSPC/Q
C
SRHOPO = SRHOPO + RHOPON
C
*****
***** CALCULANDO O COEF. COEF = [1.0 + (N-1)RHOPON] *****
***** DA EXPRESSAO (2.21) *****
*****
C
COEF = 1.0 + (N-1)*RHOPON
C
*****
***** ESTIMANDO A VARIANCIA SIGMA2 USANDO OS RESIDUOS *****
***** DE UM UNICO AJUSTE - MQO - *****
*****
C
S2ECHO = 0
DO 160 I=1,KN
      S2ECHO = S2ECHO + ECHO(I,1)**2
160 CONTINUE
GL = FKN - FP
C
S2 = S2ECHO/GL
C
SS2 = SS2 + S2
C
*****
***** ESTIMANDO A MATRIZ DE COVARIANCIA VBCHO DO *****
***** VETOR BCHO *****
***** USANDO OS RESIDUOS DE UM UNICO AJUSTE -MQO- *****
*****
C
DO 170 I=1,P
DO 170 J=1,P
      VBCHO(I,J) = S2*XPTXPI(I,J)
170 CONTINUE
C
*****
***** O ERRO DE ESTIMATIVA DE CADA COEFICIENTE BCHO *****
***** AO NIVEL DE CONFIANCA DE 0.90 *****
***** -MQO- *****
*****

```

```

C
DO 180 I=1,10
    S0(I) = SQRT(VBCH0(I,I))
    TS0(I) = 1.664*S0(I)
180 CONTINUE
C
C *****
C ***** LIMITES DOS INTERVALOS DE 0.90 DE CONFIANCA *****
C ***** E VERIFICACAO DA INCLUSAO DOS PARAMETROS NOS *****
C ***** INTERVALOS -MQG- *****
C *****
C
DO 200 I=1,10
    EIO(I) = BCH0(I,1) - TS0(I)
    ES0(I) = BCH0(I,1) + TS0(I)
    AMPO(I) = 2.0*TS0(I)
    SAMPO(I) = SAMPO(I) + AMPO(I)
    IF(EIO(I).GT.0.0.OR.ES0(I).LT.0.0) GO TO 200
    ICONTO(I) = ICONTO(I) + 1
200 CONTINUE
C
C *****
C ***** ESTIMANDO A MATRIZ DE COVARIANCIA VBCH1 DO *****
C ***** VETOR BCH1 *****
C ***** USANDO OS RESIDUOS DE AJUSTES SEPARADOS -MQG-1- *****
C ***** COM SIGMA2 ESTIMADO POR S2PON (2.18) RESULTADO 5 *****
C *****
C
DO 210 I=1,F
DO 210 J=1,F
    VBCH1(I,J) = S2PON*COEF*XPTXPI(I,J)
210 CONTINUE
C
C *****
C ***** O ERRO DE ESTIMATIVA DE CADA COEFICIENTE BCH1 *****
C ***** AO NIVEL DE CONFIANCA DE 0.90 -MQG-1- *****
C *****
C
DO 220 I=1,F
    S1(I) = SQRT(VBCH1(I,I))
    TS1(I) = 1.664*S1(I)
220 CONTINUE
C
C *****
C ***** LIMITES DOS INTERVALOS DE 0.90 DE CONFIANCA *****
C ***** E VERIFICACAO DA INCLUSAO DOS PARAMETROS NOS *****
C ***** INTERVALOS -MQG-1- *****
C *****
C

```

```

DO 230 I=1,10
  EI1(I) = ECHO(I,1) - TS1(I)
  ES1(I) = ECHO(I,1) + TS1(I)
  AMP1(I) = 2.0*TS1(I)
  SAMP1(I) = SAMP1(I) + AMP1(I)
  IF(EI1(I).GT.0.0.OR.ES1(I).LT.0.0) GO TO 230
  ICONT1(I) = ICONT1(I) + 1

```

```

230 CONTINUE

```

```

*****
***** O FATOR DE CORRECAO DOS RESIDUOS CALCULADO COM
***** BASE NOS GRAUS DE LIBERDADE
*****

```

```

PHI = SQRT((FKN - FP)/(FKN - COEF*FP))

```

```

*****
***** O VETOR DOS RESIDUOS CORRIGIDOS      ECHC
*****

```

```

DO 240 I=1,KN
  ECHC(I,1) = PHI*ECHO(I,1)

```

```

240 CONTINUE

```

```

*****
***** ESTIMANDO A MATRIZ DE COVARIANCIA      VBCH1C
***** DO VETOR BCH1
***** USANDO OS RESIDUOS DO AJUSTE -MQO-
***** COM SIGMA2 ESTIMADO POR SIG2PO (2,10) RESULTADO 4
*****

```

```

*****
***** ESTIMANDO SIGMA2 POR SIG2PO (2,10) RESULTADO 4
*****

```

```

SIG2PO = ((FKN - FP)/(FKN - COEF*FP))*S2

```

```

SSIG2P = SSIG2P + SIG2PO

```

```

*****
***** A MATRIZ DE COVARIANCIA VBCH1C
*****

```

```

DO 250 I=1,P
DO 250 J=1,P
  VBCH1C(I,J) = SIG2PO*COEF*XPTXFI(I,J)

```

```

250 CONTINUE

```



```

C
C
C *****
C ***** O ERRO DE ESTIMATIVA DE CADA COEFICIENTE BCH1 *****
C ***** AO NIVEL DE CONFIANCA DE 0.90 -MQG-1C- *****
C *****
C
DO 260 I=1,P
    S1C(I) = SQRT(VBCH1C(I,I))
    TS1C(I) = 1.664*S1C(I)
260 CONTINUE
C
C *****
C ***** LIMITES DOS INTERVALOS DE 0.90 E VERIFICACAO DA *****
C ***** INCLUSAO DOS PARAMETROS NOS INTERVALOS *****
C ***** -MQG-1C- *****
C *****
C
DO 270 I=1,10
    EI1C(I) = BCH0(I,1) - TS1C(I)
    ES1C(I) = BCH0(I,1) + TS1C(I)
    AMP1C(I) = 2.0*TS1C(I)
    SAMP1C(I) = SAMP1C(I) + AMP1C(I)
    IF(EI1C(I).GT.0.0.OR.ES1C(I).LT.0.0) GO TO 270
    ICON1C(I) = ICON1C(I) + 1
270 CONTINUE
C
C
C *****
C ***** O B O O T S T R A P *****
C *****
C
DO 280 I=1,10
    ICONTI(I) =0.0
    ICONTS(I) =0.0
280 CONTINUE
C
C *****
C ***** INCIO DO ELO BOOTSTRAP *****
C *****
C
DO 400 J=1,NBS
C
C *****
C ***** GERANDO OS RESIDUOS BOOTSTRAP *****
C *****
C
DO 290 I=1,K
    U = RAN(ISEED)
    IK = 5*INT(18*U + 1.0)
    EBS(5*I - 4) = ECHC(IK,1)
    EBS(5*I - 3) = ECHC(IK-1,1)
    EBS(5*I - 2) = ECHC(IK-2,1)
    EBS(5*I - 1) = ECHC(IK-3,1)
    EBS(5*I) = ECHC(IK-4,1)
290 CONTINUE

```

```

C                                     C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C
C      DO 300 I=1,KN
C          YBS(I,1) = YCH0(I,1) + EBS(I)
300  CONTINUE
C
C      *****                      C
C      ***** O VETOR BBS(10) DAS ESTIMATIVAS BOOTSTRAP DOS ***** C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      CALL VMULFF(XPTXPT,YBS,P,KN,1,P,KN,BBS,P,IER)
C
C      *****                      C
C      ***** VERIFICACAO DA INCLUSAO DOS PARAMETROS NOS INTVS. ***** C
C      *****                      C
C      *****                      C
C
C      DO 310 I=1,10
C          IF(BBS(I).LT.0.0) GO TO 305
C          IF(BBS(I).GT.0.0) GO TO 307
C          GO TO 310
305  ICONTI(I) = ICONTI(I) + 1
C          GO TO 310
307  ICONTS(I) = ICONTS(I) + 1
310  CONTINUE
C
C      400  CONTINUE
C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C
C      DO 410 I=1,10
C          IF(ICONTI(I).LT.EIBS.OR.ICONTS(I).GT.ESBS) GO TO 410
C          ICONTB(I) = ICONTB(I) + 1
410  CONTINUE
C
C      500  CONTINUE
C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C      *****                      C
C
C      FPMC = FLOAT(NMC)
C
C      DO 510 I=1,10

```

```

C                                     [
C      *****                                     ***** [
C      ***** AMPLITUDES MEDIAS PARA AS NMC REPETICOES M.CARLO ***** [
C      *****                                     ***** [
C
C      AMP0B(I) = SAMP0(I)/FNMC
C      AMP1B(I) = SAMP1(I)/FNMC
C      AMP1CB(I) = SAMP1C(I)/FNMC
510  CONTINUE
C
C      *****                                     ***** C
C      *****      RESULTADOS  GERAIS  DA  SIMULACAO      ***** C
C      *****                                     ***** C
C
C      OPEN (UNIT=23,FILE='SIMU5',ACCESS='SEQOUT')
C      WRITE(23,515)
515  FORMAT(' RESULTADOS GERAIS DA SIMULACAO',/)
C      WRITE(23,517) ISEED,NMC,NBS,EIBS,ESBS
517  FORMAT(' SEM = ',I8,' NMC = ',I6,' NBS= ',I6,' INT: ',F6.1,2X,F6.1)
C      WRITE(23,518)
518  FORMAT(/)
C      DO 530 I=1,10
C          WRITE(23,520),ICONTO(I),ICONTO1(I),ICON1C(I),ICONTB(I)
520  FORMAT(3X,'MQO = ',I4,3X,'MQG-1 = ',I4,3X,'MQG-1C = ',
*      I4,3X,'BTS = ',I4)
C
C
C      WRITE(23,525),AMP0B(I),AMP1B(I),AMP1CB(I)
525  FORMAT(' AMP MED MQO = ',F10.5,' AMP MED MQG-1 = ',F10.5,
*      ' AMP MED MQG-1C = ',F10.6)
C
C      CONTINUE
530
C
C      *****                                     ***** C
C      ***** OS VALORES MEDIOS DAS ESTIMATIVAS DA VARIANCIA ***** C
C      ***** OBTIDOS NA SIMULACAO COM OS DIVERSOS ESTIMADORES ***** C
C      ***** BEM COMO O VALOR MEDIO DA ESTIMATIVA DE RHO ***** C
C      *****                                     ***** C
C
C      S2M = SS2/FNMC
C      SIG2PM = SSIG2P/FNMC
C      S2PONM = SS2PON/FNMC
C      RHOPOM = SRHOPO/FNMC
C
C      WRITE(23,550),S2M,SIG2PM,S2PONM,RHOPOM
550  FORMAT(' S2M = ',F10.4,' SIG2PM = ',F10.4,' S2PONM = ',F10.4,
*      ' RHOPOM = ',F10.4)
C      CLOSE (UNIT=23)
C      STOP
C      END
C
C
C

```

R E F E R Ê N C I A S

- |1| EFRON, B. Bootstrap Methods: another look at the
 Jackknife. The Annals of Statistics ,
 1979, v. 7, n.1, p. 1-26.

- |2| BICKEL, P.J. and Freedman, D.A. Some asymptotic
 theory for the Bootstrap. The Annals of
 Statistics,
 1981, v. 9, n.6, p. 1196-1217.

- |3| SINGH, K. On the asymptotic accuracy of Efron's
 Bootstrap. The Annals of Statistic ,
 1981 , v. 9, n.6, p. 1187-1195.

- |4| BERAN, R. Estimated sampling distributions: the
 Bootstrap and competitors. The Annals'
 of Statistics,
 1982, v. 10, n.1, p. 212-225.

- |5| EFRON, B. Computers and the theory of statistics:
 thinking the unthinkable. Siam Review,
 1979, v. 21, n.4, p. 460-480.

- |6| FREEDMAN, D.A. Bootstrapping regression models.
 The Annals of Statistic,
 1981, v. 9, n.6, p. 1218-1228.

- |7| RUBIN, D.B. The bayesian Bootstrap. The Annals
 of Statistics,
 1981, v. 9, n.1, p. 130-134.

- |8| FREEDMAN, D.A. and PETERS, S.C. Bootstrapping a
 regression equation: some empirical re
 sults.
 Jasa, mar.1984, v. 79, n.385, p.97-106.

- |9| MILLER, R.G. The Jackknife-a review. *Biometrika*, 1974, v. 61, n.1, p. 1-17.
- |10| NETO, A.C. Bootstrap e Regressão. Uma Opção aos Mínimos Quadrados Generalizados. Tese de Mestrado. UNICAMP, 1985.
- |11| WAHRENDORF, J. and BROWN, C.C. Bootstrapping a Basic Inequality in the Analysis of Joint Action of Two Drugs. *Biometrics*, Dez. 1980, n.36, p. 653-657.
- |12| EFRON, B. and DIACONIS, P. Computer-Intensive Methods in Statistics. *Scientific American*, May, 1983, p. 96-108.
- |13| GYNOR, B. and SWITZER, P. The Variability of Acid Rainfall. Technical Report, 1982, n.58, Department of Statistics, Stantard University.
- |14| BOX, G.E.P. and HUNTER, J.S. Multi-factor Experimental Designs for Exploring Responce' Surfaces. *Ann. Math. Stat.* 1957, v. 28, p. 195-241.
- |15| COCHRAN, W.G. and COX, G.M. Experimental Designs. 2.ed., 1957. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- |16| BARTLETT, M.S. Multivariate Statistics In Theoretical and Mathematical Biology. Waterman, T.H. and Morowitz, H.J., eds. Blaisdell, N.Y., 1965.
- |17| BARTLETT, M.S. An inverse matrix adjustment arising in discriminant analysis. *Annals of Mathematical Statistics*, v.22, p. 107-111.

